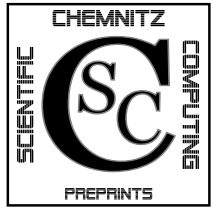
TECHNISCHE UNIVERSITÄT CHEMNITZ

Uwe-Jens Görke Ralf Landgraf Reiner Kreißig

Thermodynamisch konsistente Formulierung des gekoppelten Systems der Thermoelastoplastizität bei großen Verzerrungen auf der Basis eines Substrukturkonzepts

CSC/08-05



Chemnitz Scientific Computing Preprints

Chemnitz Scientific Computing Preprints – ISSN 1864-0087

Impressum:

Chemnitz Scientific Computing Preprints — ISSN 1864-0087
(1995–2005: Preprintreihe des Chemnitzer SFB393)

Herausgeber:
Professuren für
Numerische und Angewandte Mathematik
an der Fakultät für Mathematik
der Technischen Universität Chemnitz

Postanschrift:
TU Chemnitz, Fakultät für Mathematik
09107 Chemnitz
Sitz:
Reichenhainer Str. 41, 09126 Chemnitz

http://www.tu-chemnitz.de/mathematik/csc/

TECHNISCHE UNIVERSITÄT CHEMNITZ

Chemnitz Scientific Computing Preprints

Uwe-Jens Görke Ralf Landgraf Reiner Kreißig

Thermodynamisch konsistente Formulierung des gekoppelten Systems der Thermoelastoplastizität bei großen Verzerrungen auf der Basis eines Substrukturkonzepts

CSC/08-05

Zusammenfassung

Non-negligible coupled thermal and mechanical effects occur in several physical and industrial procedures, e. g. warm forming processes. The authors present the theoretical background of a phenomenological thermoelastoplastic material model at large strains as well as its numerical realization within the context of appropriate finite element formulations. As usual, the presented thermodynamical consistent constitutive approach is based on the multiplicative decomposition of the deformation gradient, and a corresponding additive decomposition of the free Helmholtz energy density. For the numerical treatment of thermoelastoplastic problems within a finite element approach, weak formulations of the balance equation of momentum and the heat conduction equation in material description are developed. For the solution of non-linear boundary value problems the linearization of the weak formulations is presented. Within the context of the mechanical problem the temperature dependence of material parameters as well as the thermal expansion are considered. The temperature evolution will be affected by non-thermal phenomena like the thermoelastic effect and plastic dissipation. Several numerical procedures for the solution of the coupled thermomechanical problem are discussed.

CSC/08-05 ISSN 1864-0087 September 2008

Inhaltsverzeichnis

1 Einführung **1**

2 Konzept der Substruktur **4**

3 Thermodynamisch konsistentes Deformationsgesetz der anisotropen finiten Thermoelastoplastizität **8**
3.1 Kinematik 8
3.2 Hyperelastisches Teildeformationsgesetz 13
3.3 Entropie und Wärmeflussvektor 17
3.4 Plastisches Teildeformationsgesetz 18
3.5 Auswahl spezieller temperaturabhängiger konstitutiver Funktionen 22

4 Wärmeleitungsgleichung unter Berücksichtigung des thermoelastischen Effekts und dissipativer Terme **27**

5 Randwertaufgabe der Thermoelastoplastizität bei großen Verzerrungen in Lagrangescher Formulierung **31**
5.1 Schwache Formulierungen des Impulssatzes und der Wärmeleitungsgleichung 31
5.2 Linearisierung der schwachen Formulierungen 36
5.3 Alternativen zur Behandlung der gekoppelten Aufgabe 48

6 Zusammenfassung und Ausblick **49**

Author's addresses:

Uwe-Jens Görke

TU Chemnitz
Fakultät für Maschinenbau
Professur Festkörpermechanik
now at: Helmholtz-Zentrum
für Umweltforschung – UFZ
Department Umweltinformatik
Permoserstr. 15
D-04318 Leipzig

Reiner Kreißig
Ralf Landgraf
TU Chemnitz
Fakultät für Maschinenbau
Professur Festkörpermechanik
Straße der Nationen 62
D-09111 Chemnitz

`http://www.tu-chemnitz.de/mb/FestKoerpMech/`
`http://www.ufz.de`

05-18 M. Randrianarivony, G. Brunnett. Quadrilateral removal and 2-ear theorems. December 2005.

05-19 P. Benner, E. S. Quintana-Ortí, G. Quintana-Ortí. Solving linear-quadratic optimal control problems on parallel computers. December 2005.

06-01 T. Eibner, J. M. Melenk. p-FEM quadrature error analysis on tetrahedra. October 2006.

06-02 P. Benner, H. Faßbender. On the solution of the rational matrix equation $X = Q + LX^{-1}L^{\top}$. September 2006.

06-03 P. Benner, H. Mena, J. Saak. On the Parameter Selection Problem in the Newton-ADI Iteration for Large Scale Riccati Equations. October 2006.

06-04 J. M. Badía, P. Benner, R. Mayo, E. S. Quintana-Ortí, G. Quintana-Ortí, A. Remón. Balanced Truncation Model Reduction of Large and Sparse Generalized Linear Systems. November 2006.

07-01 U. Baur, P. Benner. Gramian-Based Model Reduction for Data-Sparse Systems. February 2007.

07-02 A. Meyer. Grundgleichungen und adaptive Finite-Elemente-Simulation bei „Großen Deformationen". Februar 2007.

07-03 P. Steinhorst. Rotationssymmetrie für piezoelektrische Probleme. Februar 2007.

07-04 S. Beuchler, T. Eibner, U. Langer. Primal and Dual Interface Concentrated Iterative Substructuring Methods. April 2007.

07-05 T. Hein, M. Meyer. Simultane Identifikation voneinander unabhängiger Materialparameter - numerische Studien. Juni 2007.

07-06 A. Bucher, U.-J. Görke, P. Steinhorst, R. Kreißig, A. Meyer. Ein Beitrag zur adaptiven gemischten Finite-Elemente-Formulierung der nahezu inkompressiblen Elastizität bei großen Verzerrungen. September 2007.

07-07 U.-J. Görke, A. Bucher, R. Kreißig Zur Numerik der inversen Aufgabe für gemischte (u/p) Formulierungen am Beispiel der nahezu inkompressiblen Elastizität bei großen Verzerrungen. October 2007.

07-08 A. Meyer, P. Steinhorst. Betrachtungen zur Spektraläquivalenz für das Schurkomplement im Bramble-Pasciak-CG bei piezoelektrischen Problemen. Oktober 2007.

07-09 T. Hein, M. Meyer. Identification of material parameters in linear elasticity - some numerical results. November 2007.

07-10 T. Hein. On solving implicitly defined inverse problems by SQP-approaches. December 2007.

The complete list of CSC and SFB393 preprints is available via
`http://www.tu-chemnitz.de/mathematik/csc/`

04-13 M. Jung, T. D. Todorov. On the Convergence Factor in Multilevel Methods for Solving 3D Elasticity Problems. December 2004.

05-01 C. Pester. A residual a posteriori error estimator for the eigenvalue problem for the Laplace-Beltrami operator. January 2005.

05-02 J. Badía, P. Benner, R. Mayo, E. Quintana-Ortí, G. Quintana-Ortí, J. Saak. Parallel Order Reduction via Balanced Truncation for Optimal Cooling of Steel Profiles. February 2005.

05-03 C. Pester. CoCoS – Computation of Corner Singularities. April 2005.

05-04 A. Meyer, P. Nestler. Mindlin-Reissner-Platte: Einige Elemente, Fehlerschätzer und Ergebnisse. April 2005.

05-05 P. Benner, J. Saak. Linear-Quadratic Regulator Design for Optimal Cooling of Steel Profiles. April 2005.

05-06 A. Meyer. A New Efficient Preconditioner for Crack Growth Problems. April 2005.

05-07 A. Meyer, P. Steinhorst. Überlegungen zur Parameterwahl im Bramble-Pasciak-CG für gemischte FEM. April 2005.

05-08 T. Eibner, J. M. Melenk. Fast algorithms for setting up the stiffness matrix in hp-FEM: a comparison. June 2005.

05-09 A. Meyer, P. Nestler. Mindlin-Reissner-Platte: Vergleich der Fehlerindikatoren in Bezug auf die Netzsteuerung Teil I. June 2005.

05-10 A. Meyer, P. Nestler. Mindlin-Reissner-Platte: Vergleich der Fehlerindikatoren in Bezug auf die Netzsteuerung Teil II. July 2005.

05-11 A. Meyer, R. Unger. Subspace-cg-techniques for clinch-problems. September 2005.

05-12 P. Ciarlet, Jr, B. Jung, S. Kaddouri, S. Labrunie, J. Zou. The Fourier Singular Complement Method for the Poisson Problem. Part III: Implementation Issues. October 2005.

05-13 T. Eibner, J. M. Melenk. Multilevel preconditioning for the boundary concentrated *hp*-FEM. December 2005.

05-14 M. Jung, A. M. Matsokin, S. V. Nepomnyaschikh, Yu. A. Tkachov. Multilevel preconditioning operators on locally modified grids. December 2005.

05-15 S. Barrachina, P. Benner, E. S. Quintana-Ortí. Solving Large-Scale Generalized Algebraic Bernoulli Equations via the Matrix Sign Function. December 2005.

05-16 B. Heinrich, B. Jung. Nitsche- and Fourier-finite-element method for the Poisson equation in axisymmetric domains with re-entrant edges. December 2005.

05-17 M. Randrianarivony, G. Brunnett. C^0-paving of closed meshes with quadrilateral patches. December 2005.

1 Einführung

Reale ingenieurtechnische Prozesse sind häufig durch die Wechselwirkung zwischen mechanischen und thermischen Feldern sowie die damit verbundene Umwandlung mechanischer Energie in Wärmeenergie und umgekehrt charakterisiert. Zudem ist das mechanische Materialverhalten selbst im isothermen Fall häufig stark temperaturabhängig. Ein typisches Beispiel stellen die dissipativen Vorgänge der Elastoplastizität dar, die eine große praktische Relevanz z. B. bei der Analyse von Umformvorgängen aufweisen.

Die Modellierung und Simulation entsprechender Aufgabenstellungen führt auf die Lösung von gekoppelten Problemen, was besondere Anforderungen an Effizienz und Robustheit der Lösungsverfahren stellt. In diesem Zusammenhang ist zur Berechnung von Spannungs-, Deformations- und Temperaturfeldern als Grundlage für die Qualitätsbeurteilung und Optimierung technischer Prozesse die Lösung eines vollständigen Anfangs-Randwert-Problems z. B. mit Hilfe der Finite Elemente Methode (FEM) erforderlich.

Thermomechanische Probleme sind im Einzelnen durch folgende Kopplungseffekte charakterisiert:

- Temperaturabhängigkeit der Materialparameter,
- Einfluss der Temperaturgeschichte auf Spannungs- und Verzerrungsfelder durch thermische Ausdehnung,
- Wärmeentwicklung infolge der internen Energiedissipation und der Randreibung.

Die stabile und effektive numerische Simulation der so miteinander verkoppelten Temperatur- und mechanischen Felder ist Gegenstand langjähriger Untersuchungen in der Kontinuumsmechanik. Die Berücksichtigung der einzelnen Koppelterme wird dabei in der Literatur unterschiedlich gehandhabt. So werden z. B. in [8,60] Algorithmen zur Diskretisierung und FEM-Formulierung für das Wärmeleitproblem mit mechanischen Koppeltermen vorgestellt, in dessen Rahmen plastische Dissipationsanteile nach Erfahrungswerten gewichtet werden. Diese Vorgehensweise ist auch in kommerziellen FE-Programmen realisiert und mit dem Gedanken verbunden, dass die plastische Leistung nur zum Teil in Wärme umgewandelt wird. Der restliche Teil führt zu Strukturänderungen auf der Mikroskala und ist partiell reversibel.

Jahnson [26] gibt hingegen eine thermodynamisch konsistente Ableitung konkreter Entwicklungsgleichungen für die inneren Variablen zur Beschreibung der isotropen und kinematischen Verfestigung auf der plastischen Zwischenkonfiguration an, bei der die Temperaturabhängigkeit in den Materialparametern berücksichtigt wird. Kopplungseffekte durch Dissipationsterme werden nicht betrachtet.

Bei vollständiger Berücksichtigung möglicher Abhängigkeiten von mechanischen und Temperaturfeldern in der Definition der freien Energiedichtefunktion und deren konsequenter Auswertung im Rahmen der Hauptsätze der Thermodynamik ergeben sich jedoch alle Anteile in konsistenter Weise. Als richtungweisend in der Literatur zur numerischen Simulation gekoppelter thermomechanischer Probleme gelten in dieser Hinsicht die Untersuchungen von Simo und Miehe [51]. Die Autoren geben die abgeschlossene Formulierung eines physikalisch motivierten Modells der klassischen Thermoplastizität bei großen Verzerrungen einschließlich der detaillierten Beschreibung der numerischen Aspekte im Zusammenhang mit der FE-Formulierung des Problems an. Zudem werden die einzelnen Anteile der freien Helmholtz-Energiedichtefunktion (elastisch, plastisch, thermisch) einer gründlichen Analyse hinsichtlich ihrer konkreten, thermodynamisch konsistenten Formulierung unterzogen. Um die bestimmenden Effekte der thermomechanischen Kopplung zu zeigen, werden dabei die Materialparameter als temperaturunabhängig angenommen. In der neueren Literatur bezieht sich z. B. die Arbeit [8] unmittelbar auf Simo und Miehe. Ähnlich umfassende Darstellungen des gekoppelten thermomechanischen Problems bei Berücksichtigung unterschiedlicher konkreter Materialmodelle finden sich in [15, 20, 24, 33, 56].

Da die Wärmeleitungsgleichung als Ausdruck der Energiebilanz ebenso wie die Impulsbilanz räumliche Differentialoperatoren enthält, ist die Temperaturverteilung numerisch als Feldproblem zu behandeln. Auf der Basis einer analogen Vorgehensweise wie bei der Gleichgewichtsbedingung kann eine schwache Form der Wärmeleitungsgleichung abgeleitet und einer üblichen Ortsdiskretisierung, z. B. mit Hilfe der FEM, zugeführt werden. Beeinflussen sich mechanische und thermische Felder gegenseitig, liegt eine gekoppelte Aufgabe vor. In [57] werden folgende Möglichkeiten zur Lösung gekoppelter thermomechanischer Feldprobleme aufgezeigt:

- Zwangsentkoppelter, gestaffelter Algorithmus:

  Das mechanische und das thermische Teilsystem werden voneinander getrennt gelöst, wobei die in einer Aufgabe enthaltenen Variablen des jeweils anderen Teilproblems als aus dem vorhergehenden Schritt bekannt und für den aktuellen (Teil-)Schritt als konstant angesehen werden (vgl. [1,27,35]). In diesem Zusammenhang kann das mechanische Teilproblem als isotherm oder adiabatisch angesehen werden. Die zwangsentkoppelte Vorgehensweise hat den Vorteil, dass die Algorithmen und Programme zur Simulation isothermer Vorgänge nicht entscheidend geändert werden müssen und die numerischen Verfahren nicht an Effizienz und Stabilität einbüßen.

- Gestaffelter Algorithmus mit iterativer Berücksichtigung der Kopplung:

  Hierbei werden nach der entkoppelten Bearbeitung der beiden Teilaufgaben dieselben durch gegenseitiges Einsetzen der soeben verbesserten Teilproblemlösung (Austausch geeigneter Lastterme) iterativ erneut gelöst, ohne dabei äuße-

03-15 Th. Apel, S. Nicaise. The inf-sup condition for the Bernardi-Fortin-Raugel element on anisotropic meshes. September 2003.

03-16 G. Kunert, Z. Mghazli, S. Nicaise. A posteriori error estimation for a finite volume discretization on anisotropic meshes. September 2003.

03-17 B. Heinrich, K. Pönitz. Nitsche type mortaring for singularly perturbed reaction-diffusion problems. October 2003.

03-18 S. I. Solov'ëv. Vibrations of plates with masses. November 2003.

03-19 S. I. Solov'ëv. Preconditioned iterative methods for a class of nonlinear eigenvalue problems. November 2003.

03-20 M. Randrianarivony, G. Brunnett, R. Schneider. Tessellation and parametrization of trimmed surfaces. December 2003.

04-01 A. Meyer, F. Rabold, M. Scherzer. Efficient Finite Element Simulation of Crack Propagation. February 2004.

04-02 S. Grosman. The robustness of the hierarchical a posteriori error estimator for reaction-diffusion equation on anisotropic meshes. March 2004.

04-03 A. Bucher, A. Meyer, U.-J. Görke, R. Kreißig. Entwicklung von adaptiven Algorithmen für nichtlineare FEM. April 2004.

04-04 A. Meyer, R. Unger. Projection methods for contact problems in elasticity. April 2004.

04-05 T. Eibner, J. M. Melenk. A local error analysis of the boundary concentrated FEM. May 2004.

04-06 H. Harbrecht, U. Kähler, R. Schneider. Wavelet Galerkin BEM on unstructured meshes. May 2004.

04-07 M. Randrianarivony, G. Brunnett. Necessary and sufficient conditions for the regularity of a planar Coons map. May 2004.

04-08 P. Benner, E. S. Quintana-Ortí, G. Quintana-Ortí. Solving Linear Matrix Equations via Rational Iterative Schemes. October 2004.

04-09 C. Pester. Hamiltonian eigenvalue symmetry for quadratic operator eigenvalue problems. October 2004.

04-10 T. Eibner, J. M. Melenk. An adaptive strategy for hp-FEM based on testing for analyticity. November 2004.

04-11 B. Heinrich, B. Jung. The Fourier-finite-element method with Nitsche-mortaring. November 2004.

04-12 A. Meyer, C. Pester. The Laplace and the linear elasticity problems near polyhedral corners and associated eigenvalue problems. December 2004.

02-17 M. Morgenstern, J. Klijn, Chr. Meyer, R. A. Römer, R. Wiesendanger. Comparing measured and calculated local density of states in a disordered two-dimensional electron system. September 2002.

02-18 J. Hippold, G. Rünger. Task Pool Teams for Implementing Irregular Algorithms on Clusters of SMPs. October 2002.

02-19 H. Harbrecht, R. Schneider. Wavelets for the fast solution of boundary integral equations. October 2002.

02-20 H. Harbrecht, R. Schneider. Adaptive Wavelet Galerkin BEM. October 2002.

02-21 H. Harbrecht, R. Schneider. Wavelet Galerkin Schemes for Boundary Integral Equations - Implementation and Quadrature. October 2002.

03-01 E. Creusé, G. Kunert, S. Nicaise. A posteriory error estimation for the Stokes problem: Anisotropic and isotropic discretizations. January 2003.

03-02 S. I. Solov'ëv. Existence of the guided modes of an optical fiber. January 2003.

03-03 S. Beuchler. Wavelet preconditioners for the p-version of the FEM. February 2003.

03-04 S. Beuchler. Fast solvers for degenerated problems. February 2003.

03-05 A. Meyer. Stable calculation of the Jacobians for curved triangles. February 2003.

03-06 S. I. Solov'ëv. Eigenvibrations of a plate with elastically attached load. February 2003.

03-07 H. Harbrecht, R. Schneider. Wavelet based fast solution of boundary integral equations. February 2003.

03-08 S. I. Solov'ëv. Preconditioned iterative methods for monotone nonlinear eigenvalue problems. March 2003.

03-09 Th. Apel, N. Düvelmeyer. Transformation of hexahedral finite element meshes into tetrahedral meshes according to quality criteria. May 2003.

03-10 H. Harbrecht, R. Schneider. Biorthogonal wavelet bases for the boundary element method. April 2003.

03-11 T. Zhanlav. Some choices of moments of refinable function and applications. June 2003.

03-12 S. Beuchler. A Dirichlet-Dirichlet DD-pre-conditioner for p-FEM. June 2003.

03-13 Th. Apel, C. Pester. Clément-type interpolation on spherical domains - interpolation error estimates and application to a posteriori error estimation. July 2003.

03-14 S. Beuchler. Multi-level solver for degenerated problems with applications to p-version of the fem. *(Dissertation)* July 2003.

re Lasten zu erhöhen. Iterativ entkoppelte Zweischrittverfahren mit unterschiedlicher Reihenfolge der Teilschritte werden u. a. in [29, 39, 53, 58] vorgestellt.

- Vollständige Kopplung:

  Bei der vollständigen Kopplung werden die thermischen und mechanischen Felder gleichzeitig im Rahmen einer gemischten FEM-Formulierung gelöst (vgl. [8, 33, 45, 51, 60]). Für die Zeitdiskretisierung der Differentialoperatoren werden meist implizite Verfahren genutzt und zur Verbesserung der numerischen Stabilität die gekoppelten Anteile der Gesamtsteifigkeitsmatrix mitunter vernachlässigt. Neben dem impliziten Euler-Verfahren zur Zeitdiskretisierung setzt sich neuerdings ein generalisiertes implizites Einschrittverfahren mit freier Wichtung der gegebenen und gesuchten Lösungsanteile durch (vgl. [19, 60]). Gemischte FEM-Formulierungen stellen hohe Anforderungen an stabile und effiziente Solvertechniken.

Eine interessante Variante für einen gestaffelten Algorithmus mit iterativer Berücksichtigung der Kopplung wird in [51] ausführlich behandelt. Diese basiert auf einer Produktformel von zwei nacheinander auszuführenden Teilalgorithmen und erweist sich in numerischen Beispielen als außerordentlich genau.

Abweichend von den vorgestellten Möglichkeiten wird in [57] am Beispiel kleiner thermoelastisch-plastischer Verzerrungen ein Algorithmus zur teilweisen Elimination der Variablen des einen Teilsystems aus dem anderen untersucht, der jedoch an bestimmte Strukturen der Systeme und besondere Annahmen zum Materialverhalten gebunden ist.

Mit diesem Überblick zum Stand der numerischen Untersuchungen für gekoppelte thermomechanische Problemstellungen konnte die relevante Literatur keinesfalls umfassend behandelt werden. Die genannten Publikationen stellen lediglich eine exemplarische Auswahl an Quellen dar. Für weiterführende Studien wird u. A. auf die in den zitierten Arbeiten angegebenen, teils sehr umfangreichen Literaturverzeichnisse verwiesen.

In der vorliegenden Arbeit werden die wesentlichen theoretischen Grundlagen und die numerische Realisierung eines thermodynamisch konsistenten Ansatzes der Thermoelastoplastizität bei großen Verzerrungen unter besonderer Berücksichtigung des Substrukturkonzepts dargelegt. Die Ausführungen sind wie folgt gegliedert: Im Abschnitt 2 werden die Grundlagen des Konzepts der Substruktur für die Erfassung der plastischen Anisotropie präsentiert. Der Abschnitt 3 beginnt mit der Erläuterung der Kinematik des mechanischen Teilproblems der betrachteten gekoppelten Aufgabe. Weiterhin wird die thermodynamisch konsistente Ableitung der einzelnen Anteile des Deformationsgesetzes der Elastoplastizität diskutiert. Die Herleitung der Wärmeleitungsgleichung unter Berücksichtigung der speziellen Kopplungsterme aus dem mechanischen Teilproblem folgt im Abschnitt 4.

Abschließend werden im Abschnitt 5 die grundlegenden Variationsformulierungen in Lagrangescher Betrachtungsweise als Grundlage für die gemischte FE-Aufgabe einschließlich ihrer konsistenten Linearisierung dargestellt. Zusätzlich wird hier auf Alternativen zur monolithischen (echt gekoppelten) Lösung des Mehrfeldproblems eingegangen.

Bezüglich der verwendeten Notation werden Vektoren und Tensoren in symbolischer Schreibweise durch Fettdruck gekennzeichnet. Die mehrfache Überschiebung von Tensoren wird durch eine entsprechende Anzahl von Punkten zwischen den Variablen markiert. Hingegen wird bei der einfachen Überschiebung auf den Punkt verzichtet. Mehrfache Überschiebungen sind durch die Bildung von Skalarprodukten der entsprechenden Basisvektoren von innen beginnend nach außen charakterisiert (alternativ existiert in der Literatur die Konvention, die Skalarprodukte fortlaufend mit den ersten Basisvektoren beginnend zu bilden). Für zwei zweistufige Tensoren $\boldsymbol{a}$ und $\boldsymbol{b}$ gilt somit $\boldsymbol{a} \cdot\cdot \boldsymbol{b} = a_{ij} b^{ji}$. Das tensorielle Produkt wird mit dem Symbol $\otimes$ gekennzeichnet. Der über einem Symbol angeordnete Punkt weist auf die materielle Zeitableitung hin. Die Inversion bzw. Transposition von Tensoren ist in der üblichen Weise mit den oben rechts neben dem Variablensymbol angeordneten Indizes $()^{-1}$ bzw. $()^{\mathrm{T}}$ markiert.

Auf die Ausgangskonfiguration bezogene Variablen werden mit Großbuchstaben dargestellt, auf die Momentankonfiguration bezogene mit Kleinbuchstaben. Die analoge Notation gilt für die Indizes von Vektor- und Tensorkoordinaten. Der Bezug auf die plastische Zwischenkonfiguration, die thermische Zwischenkonfiguration und die Substrukturkonfiguration wird durch die entsprechenden Akzente $(\widetilde{\ })$, $(\breve{\ })$ bzw. $(\widehat{\ })$ jeweils über Großbuchstaben charakterisiert. Oben rechts neben einem Symbol angeordnete Indizes $()^e$, $()^p$, $()^\theta$ bezeichnen in dieser Reihenfolge elastische, plastische bzw. thermische Variablen.

2 Konzept der Substruktur

Bei der Entwicklung des im folgenden Abschnitt im Detail erläuterten Deformationsgesetzes zur Beschreibung großer anisotroper elastisch-plastischer Verzerrungen lag der Fokus auf Ansätzen, deren Basis das so genannte *Substrukturkonzept* darstellt. Dabei handelt es sich um phänomenologische Modelle, wie sie beispielsweise von Mandel [40, 41], Kratochvil [30], Onat [46], Dafalias [10–12], Peeters et al. [48], Tsakmakis [54] und Häusler et al. [23] vorgeschlagen wurden.

Die Grundidee dieser Methodologie besteht darin, nicht die reale Mikrostruktur des Werkstoffs konstitutiv zu erfassen, sondern Materialcharakteristika, die durch die Physik auf der Mikroebene verursacht werden, mit kontinuumsmechanischen Ansätzen auf der Makroebene zu beschreiben. Zu diesem Zweck werden

Some titles in this CSC and the former SFB393 preprint series:

02-01 M. Pester. Bibliotheken zur Entwicklung paralleler Algorithmen - Basisroutinen für Kommunikation und Grafik. Januar 2002.

02-02 M. Pester. Visualization Tools for 2D and 3D Finite Element Programs - User's Manual. January 2002.

02-03 H. Harbrecht, M. Konik, R. Schneider. Fully Discrete Wavelet Galerkin Schemes. January 2002.

02-04 G. Kunert. A posteriori error estimation for convection dominated problems on anisotropic meshes. March 2002.

02-05 H. Harbrecht, R. Schneider. Wavelet Galerkin Schemes for 3D-BEM. February 2002.

02-06 W. Dahmen, H. Harbrecht, R. Schneider. Compression Techniques for Boundary Integral Equations - Optimal Complexity Estimates. April 2002.

02-07 S. Grosman. Robust local problem error estimation for a singularly perturbed reaction-diffusion problem on anisotropic finite element meshes. May 2002.

02-08 M. Springmann, M. Kuna. Identifikation schädigungsmechanischer Materialparameter mit Hilfe nichtlinearer Optimierungsverfahren am Beispiel des Rousselier Modells. Mai 2002.

02-09 S. Beuchler, R. Schneider, C. Schwab. Multiresolution weighted norm equivalences and applications. July 2002.

02-10 Ph. Cain, R. A. Römer, M. E. Raikh. Renormalization group approach to energy level statistics at the integer quantum Hall transition. July 2002.

02-11 A. Eilmes, R. A. Römer, M. Schreiber. Localization properties of two interacting particles in a quasiperiodic potential with a metal-insulator transition. July 2002.

02-12 M. L. Ndawana, R. A. Römer, M. Schreiber. Scaling of the Level Compressibility at the Anderson Metal-Insulator Transition. September 2002.

02-13 Ph. Cain, R. A. Römer, M. E. Raikh. Real-space renormalization group approach to the quantum Hall transition. September 2002.

02-14 A. Jellal, E. H. Saidi, H. B. Geyer, R. A. Römer. A Matrix Model for $\nu_{k_1 k_2} = \frac{k_1+k_2}{k_1 k_2}$ Fractional Quantum Hall States. September 2002.

02-15 M. Randrianarivony, G. Brunnett. Parallel implementation of curve reconstruction from noisy samples. August 2002.

02-16 M. Randrianarivony, G. Brunnett. Parallel implementation of surface reconstruction from noisy samples. September 2002.

[49] F. Sidoroff. The geometrical concept of intermediate configuration and elastic-plastic finite strain. *Arch. of Mech.*, 25:299-308, 1973.

[50] J.C. Simo. A framework for finite strain elastoplasticity based on maximum plastic dissipation and the multiplicative decomposition: Part I. Continuum formulation. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 66:199-219, 1988.

[51] J.C. Simo and C. Miehe. Associative coupled thermoplasticity at finite strains: Formulation, numerical analysis and implementation. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 98:41-104, 1992.

[52] J.C. Simo and M. Ortiz. A unified approach to finite deformation elastoplastic analysis based on the use of hyperelastic constitutive equations. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 49:221-245, 1985.

[53] A. Srikanth and N. Zabaras. A computational model for the finite element analysis of thermoplasticity coupled with ductile damage at finite strains. *Int. J. Num. Meth. Engrg.*, 45:1569-1605, 1999.

[54] C. Tsakmakis. Description of plastic anisotropy effects at large deformations. Part I: Restrictions imposed by the second law and the postulate of Ilyushin. *Int. J. Plast.*, 20:167-198, 2004.

[55] P. Van Houtte. Fast calculation of average Taylor factors and Mandel spins for all possible strain modes. *Int. J. Plast.*, 17:807-818, 2001.

[56] L. Vujošević and V.A. Lubarda. Finite-strain thermoelasticity based on multiplicative decomposition of deformation gradient. *Theoretical and Applied Mechanics*, 28-29:379-399, 2002.

[57] K. Wegener. *Zur Berechnung großer plastischer Deformationen mit einem Stoffgesetz vom Überspannungstyp.* Braunschweiger Schriften zur Mechanik Nr. 2-1991, TU Braunschweig, 1991.

[58] P. Wriggers, C. Miehe, M. Kleiber and J.C. Simo. On the coupled thermomechanical treatment of necking problems via finite element methods. *Int. J. Numer. Meth. Engrg.*, 33:869-883, 1992.

[59] H.-C. Wu. On finite plastic deformation of anisotropic metallic materials. *Int. J. Plast.*, 19:91-119, 2003.

[60] Y.Y. Zhu and S. Cescotto. Transient thermal and thermomechanical analysis by mixed FEM. *Comp. Struct.*, 53:275-304, 1994.

spezielle innere Variablen definiert, deren Evolution mit der Veränderung mikrostruktureller Werkstoffeigenschaften (z. B. Texturentwicklung) verknüpft werden kann. Weiterhin wird vorausgesetzt, dass sich die Kinematik des Kontinuums und die der unterliegenden (gedachten) Substruktur voneinander unterscheiden, somit u. A. unterschiedliche Orientierungen aufweisen können. Damit wird im Gegensatz zu früheren anisotropen Modellen der Elastoplastizität eine separate Evolutionsgleichung für Rotationen der Substruktur notwendig[1]. In diesem Zusammenhang kritisierte Dafalias [13] die bisher in der Literatur gebräuchliche Verwendung des Begriffs *plastischer Spin* und führte den so genannten *konstitutiven Spin* zur Beschreibung der Substrukturrotation ein (siehe auch Wu [59]).

Das hier dargestellte Materialmodell der anisotropen Elastoplastizität beruht speziell auf dem Substrukturkonzept von Mandel und Dafalias. Mandel versuchte, die Entwicklung der plastischen Anisotropie durch die Definition von Vektortriaden zu beschreiben, die mit der realen Mikrostruktur des Materials (bzw. deren Orientierung) verbunden sein sollten. Die Vektortriaden bezeichnen eine ausgezeichnete Zwischenkonfiguration, deren Orientierung sich von derjenigen der materiellen Linienelemente unterscheidet. Bei Einkristallen definierte Mandel die Richtung der Vektortriaden entsprechend den Kanten des Kristallgitters, für Polykristalle führte er eine (hypothetische) gewichtete Mittelung bezüglich aller Einkristalle ein, die das Polykristall bilden. Hierin liegt ein Schwachpunkt des Ansatzes, da eine solche Mittelung in der Praxis nur mit erheblichem Aufwand zu realisieren ist. Dennoch wird diese Idee des *Mandelschen Spins* als gemittelte Orientierung des Kristallgitters in der neueren Literatur wieder aufgegriffen. Peeters et al. [48] und Van Houtte [55] schlagen beispielsweise vor, den Mandelschen Spin aus kristallographischen Texturbildern zu ermitteln, die die Entwicklung der plastischen Anisotropie charakterisieren.

Im Gegensatz zu Mandel hat Dafalias nicht versucht, die Orientierung der Substruktur in einem mikrophysikalischen Sinn aus der realen Struktur des Kristallgitters abzuleiten. Er führte vielmehr erstmals eine Unterscheidung zwischen der Kinematik des Kontinuums und der Kinematik der (dem Kontinuum unterliegenden) Substruktur ein und definierte zu diesem Zweck den speziellen Deformationsgradienten $\boldsymbol{F}_S = \boldsymbol{F}^e\boldsymbol{\beta}$ für die Beschreibung der Substrukturkinematik. Während mit $\boldsymbol{F}^e$ der elastische Anteil aus der üblichen Zerlegung des Deformationsgradienten $\boldsymbol{F} = \boldsymbol{F}^e\boldsymbol{F}^p$ für die Kontinuumskinematik bezeichnet ist ($\boldsymbol{F}^p$ definiert entsprechend den plastischen Teildeformationsgradienten), stellt $\boldsymbol{\beta}$ einen orthogonalen Tensor dar. In diesem Zusammenhang ist auch bei Dafalias die Substruktur durch ausgezeichnete Richtungen charakterisiert und kann als makroskopische Beschreibung von mikrophysikalischen Strukturen interpretiert werden. Im Gegensatz zu Mandel beschreibt Dafalias jedoch diese ausgezeichne-

[1] In einigen Arbeiten von Hill und anderen Autoren wird die Texturentwicklung über spezielle konstitutive Beziehungen an die allgemeine Kinematik des Kontinuums gebunden.

ten Richtungen mit tensorwertigen inneren Variablen. Diese kennzeichnen anisotrope Struktureigenschaften in einem phänomenologischen Sinn und müssen auf der Basis geeigneter Evolutionsgleichungen berechnet werden. Wie auch Mandel definiert Dafalias unter Nutzung des konstitutiven Spins $\boldsymbol{\omega}_D = \dot{\boldsymbol{\beta}}\boldsymbol{\beta}^{-1}$ spezielle objektive Zeitableitungen, die mit der Substrukturentwicklung verknüpft sind.

Der Kerngedanke des Ansatzes von Dafalias besteht in dem (heuristischen) Ansatz einer Evolutionsgleichung für den plastischen Spin $\boldsymbol{w}_D^p$, der die Differenz zwischen dem Spin des Kontinuums $\boldsymbol{w}$ und dem Substrukturspin darstellt:

$$\boldsymbol{w}_D^p = \boldsymbol{w} - \bar{\boldsymbol{\omega}}_D \tag{1}$$

und nach Auffassung von Dafalias mit der Texturentwicklung zu verknüpfen ist. Bei Dafalias [11, 14] und Kurode [32] werden entsprechende Evolutionsgleichungen ohne thermodynamische Begründung für den Fall der elastischen Isotropie angegeben. Formulierungen bei Annahme elastischer Anisotropie finden sich bei Häusler [22] und Cleja-Ţigoiu [9].

Basierend auf den Ideen von Mandel und Dafalias hat Bucher [3] einen verallgemeinerten Substrukturansatz entwickelt, der sowohl große elastische als auch große plastische Verzerrungen berücksichtigt. Dieses konstitutive Modell, dessen grundlegender Vorteil in seiner thermodynamischen Konsistenz liegt, stellt die Basis für den in dieser Arbeit diskutierten Ansatz der finiten Thermoelastoplastizität dar. Im Folgenden sollen lediglich einige Grundgedanken des verwendeten Substrukturkonzepts dargelegt werden. Für Details wird u. A. auf die Arbeiten [3–5, 16, 31] verwiesen.

Die Hauptidee des hier vorgestellten Substrukturkonzepts ist in der Definition einer so genannten *Substrukturkonfiguration* zu sehen, die zusätzlich zu den üblichen Konfigurationen zur Beschreibung der Kinematik des Kontinuums eingeführt wird (siehe Abbildung 1). Ein Abbildungstensor $\boldsymbol{H}$ realisiert die Transformation tensorieller Variablen zwischen der Ausgangs- und der Substrukturkonfiguration. Entsprechend dient der Tensor $\boldsymbol{F}\boldsymbol{H}^{-1}$ zur Abbildung von Variablen zwischen der Substruktur- und der Momentankonfiguration. Damit kann die Substrukturkonfiguration als inkompatible Zwischenkonfiguration aufgefasst werden, die durch eine spezielle, konstitutiv motivierte multiplikative Zerlegung des Deformationsgradienten charakterisiert wird. Sie unterscheidet sich von der üblichen, die Kinematik des Kontinuums beschreibende plastischen Zwischenkonfiguration lediglich durch eine Drehung, die mittels des eigentlich orthogonalen Tensors $\boldsymbol{\beta}$ erfasst wird. Werden die Basisvektoren eines krummlinigen Koordinatensystems bezüglich der Substrukturkonfiguration als Vektortriaden im Mandelschen Sinne verstanden, können sie als mit der Materialtextur verbunden angesehen werden.

Im Gegensatz zu Mandel und Dafalias werden im vorgestellten Substrukturkonzept die konstitutiven Beziehungen konsequent auf der Ausgangskonfiguration

[35] Z.C. Lin and S.Y. Lin. An investigation of a coupled analysis of a thermo-elasto-plastic model during warm upsetting. *Int. J. Mech. Tools Manufact.*, 30:599-612, 1990.

[36] A. Lion. On the large deformation behaviour of reinforced rubber at different temperatures. *J. Mech. Phys. Solids*, 45(11/12):1805:1834, 1997.

[37] A. Lion. *Thermomechanik von Elastomeren: Experimente und Materialtheorie.* Habilitationsschrift, Bericht Nr. 1/2000 des Instituts für Mechanik, Universität Kassel, 2000.

[38] S.C.H. Lu and K.D. Pister. Decomposition of deformation and representation of the free energy function for isotropic thermoelastic solids. *Int. J. Sol. Struct.*, 11:927-934, 1975.

[39] J.V. Lugt and J. Huetink. Thermal mechanically coupled finite element analysis in metal-forming processes. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 54:145-160, 1986.

[40] J. Mandel. Plasticité classique et viscoplasticité. In: *CISM Courses and Lectures No.97*, Springer-Verlag, Berlin, 1971.

[41] J. Mandel. Equations constitutives et directeurs dans les milieux plastiques et viscoplastiques. *Int. J. Sol. Struct.*, 9:725-740, 1973.

[42] C. Miehe. *Kanonische Modelle multiplikativer Elasto-Plastizität. Thermodynamische Formulierung und numerische Implementation.* Habil., Uni Hannover, 1992.

[43] C. Miehe. Entropic thermoelasticity at finite strains. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 120:243-369, 1995.

[44] M.N.L. Narasimhan. *Principles of continuum mechanics.* Wiley, New York, 1993.

[45] D.W. Nicholson. Large deformation theory of coupled thermoplasticity including kinematic hardening. *Acta Mechanica*, 142:207-222, 2000.

[46] E.T. Onat. Representation of inelastic behaviour in the presence of anisotropy and of finite deformations. In: *Recent advances in creep and fracture of engineering materials and structures.* Pineridge Press, Swansea, 1982.

[47] N.S. Ottosen and M. Ristinmaa. *The mechanics of constitutive modeling.* Elsevier, Kidlington, 2005.

[48] B. Peeters, E. Hoferlin, P. Van Houtte and E. Aernoudt. Assessment of crystal plasticity based calculation of the lattice spin of polycrystalline metals for FE implementation. *Int. J. Plast.*, 17:819-836, 2001.

[23] O. Häusler, D. Schick and C. Tsakmakis. Description of plastic anisotropy effects at large deformations. Part II: The case of transverse isotropy. *Int. J. Plast.*, 20:199-223, 2004.

[24] Th. Heimes. *Finite Thermoinelastizität: Experimente, Materialmodellierung und Implementierung in die FEM am Beispiel einer technischen Gummimischung*. Fortschritt-Berichte VDI, Reihe 5 Grund- und Werkstoffe/Kunststoffe, Nr. 709, VDI-Verlag, Düsseldorf, 2005.

[25] G. Holzapfel. *Physikalische Modellierung und Finite Elemente Analyse von elastomeren Systemen unter Berücksichtigung von thermomechanisch gekoppelten Problemen.* Postdoctoral thesis, University Vienna, 1995.

[26] W. Jahnson. *Formulierung und Integration von Stoffgesetzen zur Beschreibung großer Deformationen in der Thermoplastizität und -viskoplastizität*. Wissenschaftliche Berichte FZKA 6002, Karlsruhe, 1997.

[27] Y.H. Kim and R.H. Wagoner. A 3D finite element method for non-isothermal sheet-forming processes. *Int. J. Mech. Sci.*, 33:911-925, 1991.

[28] M. Kleiber. Kinematics of deformation processes in materials subjected to finite elastic-plastic strains. *Int. J. Engng. Sci.*, 13:513-525, 1975.

[29] S. Kobayashi. Thermoviscoplastic analysis of metal forming problems with finite methods. In: *Numerical Analysis of Forming Processes*, I.F.T. Pittman and O.C. Zienkiewicz (Eds.), Pineridge Press, Swansea, 984.

[30] J. Kratochvil. Finite strain theory of crystalline elastic-plastic materials. *Acta Mechanica*, 16:127-142, 1973.

[31] R. Kreißig, A. Bucher and U.-J. Görke. Hierarchical adaptive FEM at finite elastoplastic deformations, In: *Parallel Algorithms and Cluster Computing – Implementations, Algorithms, and Applications (Springer Lecture Notes in Computational Science and Engineering)*, K.H. Hoffmann and A. Meyer (Eds.), Springer, Berlin, 105-127, 2006.

[32] M. Kuroda. Interpretation of the behavior of metals under large plastic shear deformations: a macroscopic approach. *Int. J. Plast.*, 13:359-383, 1997.

[33] H. Lämmer. *Thermoplastizität und Thermoviskoplastizität mit Schädigung bei kleinen und großen Deformationen*. Wissenschaftliche Berichte FZKA 6053, Karlsruhe, 1998.

[34] K.Ch. Le and H. Stumpf. Constitutive equations for elastoplastic bodies at finite strain: thermodynamic implementation. *Acta Mechanica*, 100:155-170, 1993.

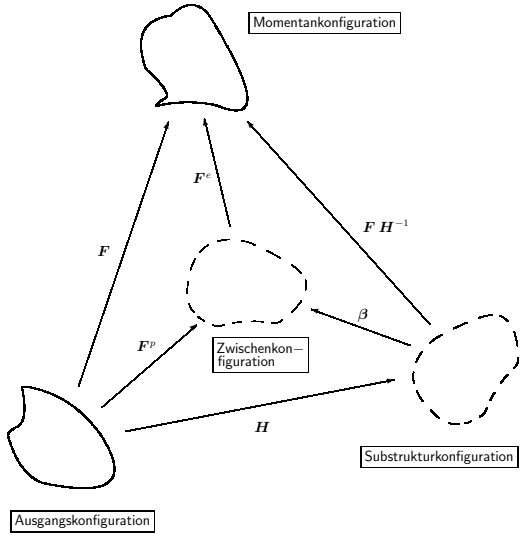


Abbildung 1: Kinematik des mechanischen Teilproblems im Rahmen des Substrukturkonzepts. Konfigurationen und Abbildungsoperationen zwischen diesen.

formuliert. Dabei ergibt sich der räumliche plastische Spin

$$\boldsymbol{w}_D^p \;=\; \frac{1}{2}\left\{\boldsymbol{F}^e\overset{\square}{\boldsymbol{F}}{}^p\boldsymbol{F}^{p-1}\boldsymbol{F}^{e-1} - \boldsymbol{F}^{e-\mathrm{T}}\boldsymbol{F}^{p-\mathrm{T}}\overset{\square}{\boldsymbol{F}}{}^{p\mathrm{T}}\boldsymbol{F}^{e\mathrm{T}}\right\} \tag{2}$$

$$\text{mit}\quad \overset{\square}{\boldsymbol{F}}{}^p = \dot{\boldsymbol{F}}^p - \boldsymbol{\omega}_D\boldsymbol{F}^p \quad\text{und}\quad \boldsymbol{\omega}_D = \dot{\boldsymbol{\beta}}\boldsymbol{\beta}^{-1}. \tag{3}$$

nach seinem pull-back auf die Ausgangskonfiguration als materielle, kovariante Größe zu

$$\boldsymbol{W}_D^p \;=\; \frac{1}{2}\left\{\boldsymbol{C}\,\boldsymbol{F}^{p-1}\overset{\square}{\boldsymbol{F}}{}^p - \overset{\square}{\boldsymbol{F}}{}^{p\mathrm{T}}\boldsymbol{F}^{p-\mathrm{T}}\boldsymbol{C}\right\}. \tag{4}$$

Da der Abbildungstensor $\boldsymbol{H}$ durch die Beziehung

$$\boldsymbol{H} = \boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{F}^p \tag{5}$$

definiert ist (vgl. Abbildung 1), folgt daraus für den verbleibenden Anteil der durch die Substruktur bedingten multiplikativen Zerlegung des Deformationsgradienten:

$$\boldsymbol{F}\,\boldsymbol{H}^{-1} \;=\; \boldsymbol{F}^e\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{F}_S. \tag{6}$$

Unter Berücksichtigung der Definitionen (3), (5) kann Gleichung (4) umformuliert werden.

$$\boldsymbol{W}_D^p = \frac{1}{2}\left\{\boldsymbol{C}\,\boldsymbol{H}^{-1}\dot{\boldsymbol{H}} - \dot{\boldsymbol{H}}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}^{-\mathrm{T}}\boldsymbol{C}\right\} \tag{7}$$

Wie bei Bucher [3] gezeigt wird, basiert die Ermittlung der Koordinaten des Abbildungstensors $\boldsymbol{H}$ auf einer speziellen konstitutiven Annahme bezüglich der Entwicklungsgleichung für den plastischen Spin (7).

Im Rahmen des vorgestellten phänomenologischen Materialmodells wird davon ausgegangen, dass die Entwicklung von Spannungen und Verzerrungen auf das Kontinuum bezogen ist, die Entwicklung von inneren Variablen zur Beschreibung des Verfestigungsverhaltens hingegen auf die dem Kontinuum unterliegende Substruktur. Damit wird es möglich, neben isotroper Verfestigung auch kinematische und formative Verfestigungsanteile zur Beschreibung der plastischen Anisotropie zu erfassen. Die Ableitung der konstitutiven Beziehungen erfolgt in thermodynamisch konsistenter Weise durch Auswertung der entsprechenden Bilanzgleichungen.

3 Thermodynamisch konsistentes Deformationsgesetz der anisotropen finiten Thermoelastoplastizität

3.1 Kinematik

In der Referenzkonfiguration (Ausgangskonfiguration) zum Zeitpunkt $t = t_0$ stellt der betrachtete Körper eine Menge $\Omega_0 \subset \mathbb{R}^3$ materieller Punkte mit dem Rand Γ_0 dar (ein Gebiet im dreidimensionalen Euklidischen Raum $\mathbb{E}^3$). Der Rand wird jeweils in Bereiche Γ_{0D} mit Dirichlet-Randbedingungen und Γ_{0N} mit Neumann-Randbedingungen bezüglich der unabhängigen Systemvariablen (hier: Verschiebungen und Temperatur) unterteilt. Dabei gilt für jede der Systemvariablen: $\Gamma_0 = \Gamma_{0D} \cup \Gamma_{0N}$ und $\Gamma_{0D} \cap \Gamma_{0N} = \emptyset$. Die materiellen Punkte werden eindeutig durch die Ortsvektoren $\boldsymbol{X} \in \Omega_0$ bzw. ihre Koordinaten (X_1, X_2, X_3) charakterisiert.

Zum aktuellen Zeitpunkt t nimmt der Körper das Gebiet $\Omega_t \subset \mathbb{R}^3$ – die Momentankonfiguration – ein. Hier werden die materiellen Punkte in den Abbildungen des Körpers durch die Ortsvektoren $\boldsymbol{x}$ bzw. ihre Koordinaten (x_1, x_2, x_3) bestimmt. Unter der Bewegung des Körpers wird die zeitliche Aufeinanderfolge von Konfigurationen verstanden. Durch das Bewegungsgesetz

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{\chi}(\boldsymbol{X}, t) \tag{8}$$

[11] Y.F. Dafalias. The plastic spin. *J. Appl. Mech.*, 52:865-871, 1985.

[12] Y.F. Dafalias. Issues on the constitutive formulation at large elastoplastic deformations, Part1: Kinematics. *Acta Mechanica*, 69:119-138, 1987.

[13] Y.F. Dafalias. Plastic spin: necessity or redundancy. *Int. J. Plast.*, 14:909-931, 1998.

[14] Y.F. Dafalias. Orientational evolution of plastic orthotropy in sheet metals. *J. Mech. Phys. Solids*, 48:2231-2255, 2000.

[15] A. Fritsch. *Finite Thermoplastizität: Materialmodellierung und Numerik thermoplastischer Werkstoffe bei finiten Deformationen.* Fortschritt-Berichte VDI, Reihe 18 Mechanik/Bruchmechanik, Nr. 290, VDI-Verlag, Düsseldorf, 2004.

[16] U.-J. Görke, A. Bucher, R. Kreißig and D. Michael. *Ein Beitrag zur Lösung von Anfangs-Randwert-Problemen einschließlich der Materialmodellierung bei finiten elastisch-plastischen Verzerrungen mit Hilfe der FEM.* Preprint SFB393/00-09, TU Chemnitz, 2000.

[17] U.-J. Görke, A. Bucher and R. Kreißig. An efficient algorithm for the integration of the initial value problem in anisotropic finite elastoplasticity considering a substructure. In: *Dislocations, Plasticity and Metal Forming*, Proc. of 10th International Symposium on Plasticity and Its Current Applications, Plasticity '03, A. S. Khan (Ed.), NEAT, Maryland,

[18] U.-J. Görke, A. Bucher and R. Kreißig. *Ein numerischer Vergleich alternativer Formulierungen des Materialmodells der anisotropen Elastoplastizität bei großen Verzerrungen.* Chemnitz Scientific Computing Preprints CSC/08-04, TU Chemnitz, 2008.

[19] M.R. Gosz. *Finite Element Method: Applications in Solids, Structures, and Heat Transfer.* CRC Press, Boca Raton, 2006.

[20] P. Håkansson, M. Wallin and M. Ristinmaa. Comparison of isotropic hardening and kinematic hardening in thermoplasticity. *Int. J. Plast.*, 21:1435-1460, 2005.

[21] P. Haupt. On the concept of an intermediate configuration and its application to a representation of viscoelastic-plastic material behavior. *Int. J. Plast.*, 1:303-316, 1985.

[22] O. Häusler. *Anisotropes plastisches Fließen bei großen Deformationen.* Dissertation. Fachbereich Maschinenbau, Universität Karlsruhe, 1999.

Literatur

[1] N. Alberti, L. Cannizzaro and F. Micari. Coupled thermal-mechanical analysis of hot forming processes. *Ann CIRP*, 39:231-234, 1990.

[2] M.C. Boyce, E.L. Montagout and A.S. Argon. The effects of thermomechanical coupling on the cold drawing process of glassy polymers. *Polym. Eng. Sci.*, 16:15-33, 1992.

[3] A. Bucher. *Deformationsgesetze für große elastisch-plastische Verzerrungen unter Berücksichtigung einer Substruktur*. Dissertation, Institut für Mechanik der TU Chemnitz, Bericht 4/01, 2001.

[4] A. Bucher, U.-J. Görke and R. Kreißig. Development of a generalized material interface for the simulation of finite elasto-plastic deformations. *Int. J. Sol. Struct.*, 38:9423-9436, 2001.

[5] A. Bucher, U.-J. Görke and R. Kreißig. A material model for finite elasto-plastic deformations considering a substructure. *Int. J. Plast.*, 20:619-642, 2004.

[6] A. Bucher, U.-J. Görke and R. Kreißig. A numerical algorithm for the computation of the plastic spin within the context of an elasto-plastic substructure model. In: *Dislocations, Plasticity, Damage and Metal Forming: Material Response and Multiscale Modeling*, Proc. of 12th International Symposium on Plasticity and Its Current Applications, Plasticity '06, A. S. Khan (Ed.), NEAT, Maryland, 2006.

[7] A. Bucher, U.-J. Görke and R. Kreißig. About an efficient and consistent numerical strategy for the solution of the initial-boundary value problem for anisotropic finite elastoplasticity. In: *Computational Mechanics – Solids, Structures and Coupled Problems*, Proceedings of III European Conference on Computational Solid and Structural Mechanics, C.A.M. Soares, J.A.C. Martins, H.C. Rodrigues, C.A.B. Pina, C.M.M. Soares, E.B.R. Pereira and J. Folgado (Eds.), Springer, Dordrecht, 2006.

[8] M. Čanadija and J. Brnić. Associative coupled thermoplasticity at finite strain with temperature-dependent material parameters. *Int. J. Plast.*, 20:1851-1874, 2004.

[9] S. Cleja-Ţigoiu. Nonlinear elasto-plastic deformations of transversely isotropic material and plastic spin. *Int. J. Eng. Sci.*, 38:737-763, 2000.

[10] Y.F. Dafalias. A missing link in the macroscopic constitutive formulation of large plastic deformations. In: *Plasticity today,*, International Symposium on Recent Trends and Results in Plasticity, A. Sawczuk and D. Bianchi (Eds.), Elsevier, Udine, 135-151, 1983.

wird für die materiellen Punkte zu jedem Zeitpunkt t ein eindeutiger Zusammenhang zwischen ihrer aktuellen Position im $\mathbb{E}^3$ und ihrer Zuordnung im Referenzzustand hergestellt. Wegen der Eineindeutigkeit der Abbildung zwischen Punkten des physikalischen Körpers und materiellen Punkten im $\mathbb{R}^3$ für alle t folgt die Gültigkeit des inversen Bewegungsgesetzes:

$$\boldsymbol{X} \;=\; \boldsymbol{\chi}^{-1}(\boldsymbol{x},t)\,. \tag{9}$$

Den Ausgangspunkt der kinematischen Betrachtungen zur Herleitung konstitutiver Gesetze bei großen Verzerrungen bildet der Deformationsgradient

$$\boldsymbol{F} \;=\; (\mathrm{Grad}\,\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}} \;=\; (\mathrm{Grad}\,\boldsymbol{u})^{\mathrm{T}} \;+\; \boldsymbol{I}\,, \tag{10}$$

welcher ein materielles Linienelement von der Ausgangs- in die Momentankonfiguration abbildet. Hierbei stellt $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x},t)$ den Verschiebungsvektor materieller Teilchen als Funktion der räumlichen Koordinaten und der Zeit dar. Mit dem Bewegungsgesetz (8) kann dieser auch als Funktion der Koordinaten der Ausgangskonfiguration und der Zeit formuliert werden:

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{\chi}(\boldsymbol{X},t),t) \;=\; \boldsymbol{U}(\boldsymbol{X},t) \;=\; \boldsymbol{x}(\boldsymbol{X},t) \;-\; \boldsymbol{X}\,. \tag{11}$$

Dabei ist die Gleichheit der Vektorfelder $\boldsymbol{u}$ und $\boldsymbol{U}$ (die unterschiedliche Vektorfunktionen sind) in dem Sinne zu verstehen, dass bei oben beschriebener Operation die speziellen Charakteristika des vektoriellen Verschiebungsfeldes (wie Länge und Richtung der Vektoren) vollständig erhalten bleiben. Es wird lediglich als Funktion unterschiedlicher Koordinaten dargestellt. Am Beispiel des Verschiebungsvektors wird die Zweckmäßigkeit einer solchen Vorgehensweise besonders augenfällig: Bei einem Vektor, der die Positionen ein und desselben materiellen Punktes zu unterschiedlichen Zeiten miteinander verbindet, aber unterschiedliche Angriffspunkte (und somit einen unterschiedlichen Richtungssinn) besitzt, ist es egal, aus welchem Bezugssystem heraus er betrachtet wird. Er bleibt derselbe Vektor mit denselben physikalischen Eigenschaften.

Im Rahmen des Wechsels des Systems der als unabhängige Variablen gewählten Ortskoordinaten ändern sich in allgemeinen krummlinigen Koordinaten adäquat sowohl die Basisvektoren als auch die Vektorkoordinaten. Eine solche Transformation kann auf beliebige Vektoren oder Tensoren angewandt werden. Sie macht sich häufig erforderlich, wenn in einer Beziehung physikalische Größen miteinander verknüpft werden sollen (z. B. im Rahmen einer Summation oder Integration), die auf unterschiedliche Punkte im $\mathbb{E}^3$ bezogen sind. Für die Vektor- bzw. Tensorkoordinaten wird die Transformation mit dem so genannten *Shifter* ausgeführt (vgl. [44] u. a.). Der Shifter ist ein zweistufiger Zweipunkttensor, dessen Koordinaten als Skalarprodukte der Basisvektoren der verschiedenen Koordinatensysteme definiert sind. Bezüglich zweier kartesischer Systemen mit zueinander

parallelen Koordinatenachsen stellt der Shifter den Einheitstensor dar. Seine Anwendung auf Vektoren führt allgemein lediglich zu deren Paralleltransport. Der Deformationsgradient (10) kann mit (11) somit auch wie folgt dargestellt werden:

$$\boldsymbol{F} \;=\; (\mathrm{Grad}\,\boldsymbol{U})^{\mathrm{T}} \;+\; \boldsymbol{I}\,. \tag{12}$$

Bezüglich der elastisch-plastischen Prozesse im Kontinuum wird im vorliegenden Modell die multiplikative Zerlegung des Deformationsgradienten $\boldsymbol{F} = \boldsymbol{F}^e\boldsymbol{F}^p$ in einen elastischen und einen plastischen Teildeformationsgradienten verwendet. Im Zusammenhang damit steht die klassische Definition dreier Konfigurationen für die Abbildung des physikalischen Körpers in den dreidimensionalen euklidischen Raum: Der Ausgangs- bzw. Referenzkonfiguration, die in der Regel mit dem undeformierten Zustand gleichgesetzt wird, der Momentankonfiguration zum aktuellen Zeitpunkt, deren zeitliche Folge die Bewegung (Deformation) des Körpers beschreibt und der plastischen Zwischenkonfiguration als eine (gedanklich) elastisch entlastete, spannungsfreie Konfiguration für die konsequent voneinander getrennte Definition der elastischen und plastischen Verzerrungsanteile (vgl. auch [21, 28, 34, 42, 49, 52]).

Zur Erfassung der plastischen Anisotropie wird ein Substrukturkonzept verwendet, das die Definition einer weiteren Konfiguration einschließt und dessen Grundgedanken im vorangegangenen Abschnitt näher erläutert wurden. Für die Berücksichtigung von Temperatureinflüssen erfolgt die thermodynamisch konsistente Erweiterung des elastisch-plastischen Deformationsgesetzes ebenfalls auf der Basis einer multiplikativen Zerlegung des Deformationsgradienten. Basierend auf Untersuchungen zur Thermoelastizität (vgl. [25, 38, 43] u. a.) wird dabei von einer Reihe Autoren die Zerlegung in einen thermischen Anteil $\boldsymbol{F}^\theta$ (reine Temperaturdehnung) und einen isothermen rein mechanischen Verzerrungsanteil $\boldsymbol{F}^M$ favorisiert. Bezüglich der Thermoelastoplastizität findet diese Methodik in dem Ansatz

$$\boldsymbol{F} \;=\; \boldsymbol{F}^e\boldsymbol{F}^p\boldsymbol{F}^\theta \;=\; \boldsymbol{F}^M\boldsymbol{F}^\theta \tag{13}$$

ihren Ausdruck (siehe bspw. [24] oder auch [36] für den Fall der Thermoviskoelastizität). Problematisch erscheint in diesem Modell die Interpretation der thermischen Zwischenkonfiguration, die zwischen der Ausgangs- und der plastischen Zwischenkonfiguration eingeordnet ist und mithin sämtliche dissipativen Prozesse des mechanischen Anteils in sich aufnimmt.

Von Boyce et al. [2] wurde als alternative Zerlegung des Deformationsgradienten die Beziehung

$$\boldsymbol{F} \;=\; \boldsymbol{F}^e\boldsymbol{F}^\theta\boldsymbol{F}^p \;=\; \boldsymbol{F}^{\theta e}\boldsymbol{F}^p \tag{14}$$

diskutiert. In der aktuellen Literatur zur Thermoelastoplastizität wird dieser Ansatz bevorzugt verwendet (vgl. [15]). Er kann als Aufspaltung in einen (reversiblen) thermoelastischen Anteil und einen plastischen Anteil der Verzerrungen

numerischen Modells ist von der Thermoelastoplastizität problemlos auf andere thermisch-mechanisch gekoppelte Aufgabenstellungen übertragbar. Dabei können auch weitere Vorgänge, wie die Kopplung zu chemischen Prozessen einbezogen werden.

stabile und effiziente Kopplung von mechanischen Prozessen, wie etwa dissipativer Vorgänge, mit dem Wärmeleitproblem bis heute eine theoretische und algorithmische Herausforderung dar. Sind zusätzlich die Erfassung nichtphysikalischer Phänomene, wie exotherme Wärmeentwicklung aufgrund chemischer Reaktionen, und/oder die vollständige Kopplung der ablaufenden Prozesse beabsichtigt (monolithische Vorgehensweise), werden aktuelle Grenzen der Theorie und Numerik erreicht, die in kommerziellen Programmen derzeit nicht umgesetzt sind. Da eine möglichst umfassende Berücksichtigung der beobachtbaren Vorgänge in komplexen Strukturen neue Einblicke in prinzipielle Wirkmechanismen der Natur sowie verbesserte quantitative Aussagen für die Beurteilung und Auslegung natürlicher und technischer Systeme ermöglicht, sind vertiefte Analysen und Studien zur Modellierung der beschriebenen Prozesse unerlässlich. Diesem Ziel diente auch die vorliegende Arbeit auf dem Gebiet der Untersuchung vollständig gekoppelter Vorgänge der Thermoelastoplastizität finiter Verzerrungen unter Berücksichtigung eines Substrukturkonzepts zur Erfassung anisotroper Verfestigungsphänomene.

Auf der Grundlage einer multiplikativen Zerlegung des Deformationsgradienten wurde eine thermodynamisch konsistente Erweiterung des ursprünglich für den isothermen Fall entwickelten elastisch-plastischen Materialmodells mit Substruktur auf große thermoelastoplastische Verzerrungen vorgenommen. Bei der Herleitung wurde eine konsequent materielle Beschreibungsweise verwendet. Dabei entstehen sowohl im Gleichungssatz für das mechanische Anfangswertproblem als auch in der Wärmeleitungsgleichung Terme, die eine echt gekoppelte numerische Behandlung des thermomechanischen Problems ermöglichen. Gegenüber anderen Materialmodellen zeichnet sich der entwickelte Ansatz besonders durch seine thermodynamische Konsistenz, seine große Flexibilität bezüglich konkreter Entwicklungsgleichungen für die inneren Variablen und die vergleichsweise einfache Erfassung komplexer Verfestigungsvorgänge aus.

Basierend auf den schwachen Formulierungen der Gleichgewichtsbeziehung und der Wärmeleitungsgleichung erfolgte die Ableitung des FEM-Gleichungssystems in einer gemischten Formulierung. Dabei wurden im Gegensatz zu den meisten, in der Literatur referierten Ansätzen zunächst konsequent alle Kopplungsterme berücksichtigt (z. B. thermoelastischer Effekt) und auf eine weitgehend konsistente Herleitung der linearisierten numerischen Beziehungen Wert gelegt. Als Alternative zur monolithischen Lösung der gemischten Formulierung, die aufgrund spezieller Problemspezifika gesonderte mathematische Betrachtungen zu Lösungseffizienz und -stabilität erfordert, wurde eine im Lastschritt entkoppelte Vorgehensweise zur numerischen Simulation des thermomechanischen Problems vorgestellt. Beginnend mit der numerischen Realisierung der strukturmechanischen und thermischen Teilprobleme wird die Umsetzung der gekoppelten Strategie in hauseigener FE-Software schrittweise verwirklicht. Die prinzipielle Vorgehensweise bei der thermodynamisch konsistenten Ableitung des mathematisch-

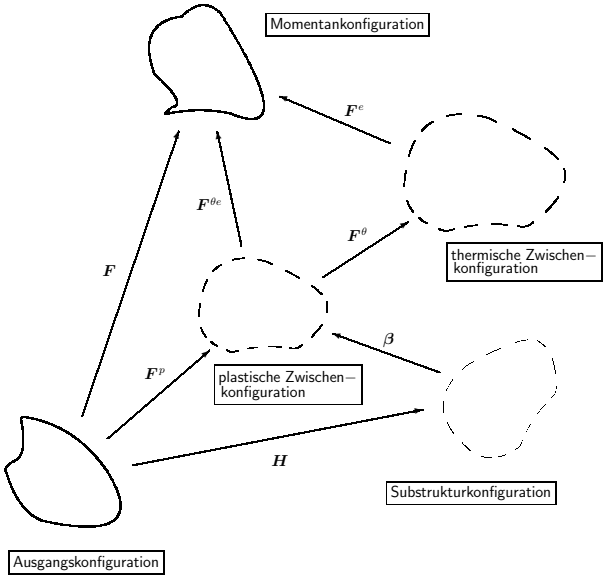


Abbildung 2: Kinematik des thermomechanischen Problems im Rahmen des Substrukturkonzepts. Konfigurationen und Abbildungsoperationen zwischen diesen.

interpretiert werden und führt zu einer Definition von Konfigurationen entsprechend Abbildung 2. Diese Aufteilung beinhaltet das Konzept einer inkompatiblen, (gedanklich) spannungsfreien plastischen Zwischenkonfiguration, die durch thermoelastische Entlastung der Momentankonfiguration entsteht. Das Modell hat bezüglich der hier favorisierten Verwendung einer Substruktur gegenüber der Zerlegung (13) des Deformationsgradienten zudem den Vorteil, dass alle Beziehungen zwischen Ausgangs- und plastischer Zwischenkonfiguration einschließlich der dazwischen geschalteten Substrukturkonfiguration prinzipiell in ihrer Struktur erhalten bleiben[2]. Dadurch wird die Herleitung von Evolutionsgleichungen für die Verfestigungsvariablen wesentlich erleichtert[3].

[2] In Zusammenhang mit der Zerlegung (13) ist kein direktes pull-back von der Substruktur- bzw. der plastischen Zwischenkonfiguration möglich. Wegen der dazwischen befindlichen thermischen Zwischenkonfiguration enthalten diese pull-back-Operationen dann den thermischen Teildeformationsgradienten.

[3] Die Vorgehensweise entspricht in diesem Fall derjenigen, wie sie für isotherme Prozesse z. B. in [3] dargestellt ist.

Bei der Berücksichtigung mehrerer konstitutiv bedingter Zwischenkonfigurationen existiert keine Konfiguration, auf der alle Verzerrungsanteile konsequent voneinander zu trennen sind. Die Aufspaltung (14) des Deformationsgradienten gestattet jedoch eine für die Entwicklung des elastischen Teildeformationsgesetzes notwendige Definition von Verzerrungsmaßen zur Beschreibung rein elastischer, reversibler Prozesse. So stellt beispielsweise der zweistufige kovariante Tensor

$$\check{\boldsymbol{E}}^e \;=\; \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{F}^{e\mathrm{T}}\boldsymbol{F}^e - \check{\boldsymbol{G}}\right) \;=\; \frac{1}{2}\left(\check{\boldsymbol{C}}^e - \check{\boldsymbol{G}}\right) \tag{15}$$

mit der kovarianten Metrik $\check{\boldsymbol{G}}$ einen elastischen Verzerrungstensor vom Greenschen Typ auf der thermischen Zwischenkonfiguration dar. Entsprechend gilt für den elastischen Strecktensor $\check{\boldsymbol{C}}^e$ vom Rechts-Cauchy-Green-Typ[4]

$$\check{\boldsymbol{C}}^e \;=\; \boldsymbol{F}^{e\mathrm{T}}\boldsymbol{F}^e\,. \tag{16}$$

Analog können auf der plastischen Zwischenkonfiguration ein thermischer Strecktensor $\widetilde{\boldsymbol{C}}^{\theta}$ sowie auf der Ausgangskonfiguration ein plastischer Strecktensor $\boldsymbol{C}^p$ definiert werden.

$$\widetilde{\boldsymbol{C}}^{\theta} \;=\; \boldsymbol{F}^{\theta\mathrm{T}}\boldsymbol{F}^{\theta} \tag{17a}$$

$$\boldsymbol{C}^p \;=\; \boldsymbol{F}^{p\mathrm{T}}\boldsymbol{F}^{p} \tag{17b}$$

Der Rechts-Cauchy-Green-Tensor der Gesamtverzerrungen $\boldsymbol{C}$ ist somit wie folgt mit den Teildeformationsgradienten verknüpft:

$$\boldsymbol{C} \;=\; \boldsymbol{F}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{F} \;=\; \boldsymbol{F}^{p\mathrm{T}}\boldsymbol{F}^{\theta\mathrm{T}}\boldsymbol{F}^{e\mathrm{T}}\boldsymbol{F}^{e}\boldsymbol{F}^{\theta}\boldsymbol{F}^{p}\,. \tag{18}$$

Den üblichen Annahmen zur Kinematik thermomechanischer Prozesse folgend wird von isotroper Wärmedehnung ausgegangen und der thermische Anteil des Deformationsgradienten in der Form

$$\boldsymbol{F}^{\theta} \;=\; \varphi(\theta)\,\boldsymbol{I} \tag{19}$$

mit einer skalarwertigen Funktion $\varphi = \varphi(\theta)$ der absoluten Temperatur θ sowie dem Einheitstensor $\boldsymbol{I}$ definiert.

[4] Verzerrungsmaße vom Rechts-Cauchy-Green-Typ stellen jeweils das pull-back der Metrik einer Konfiguration auf eine andere dar. Korrekterweise lautet die Beziehung (16) somit $\check{\boldsymbol{C}}^e = \boldsymbol{F}^{e\mathrm{T}}\boldsymbol{g}\,\boldsymbol{F}^e$ mit der kovarianten Metrik $\boldsymbol{g}$ der Momentankonfiguration. Da jedoch in symbolischer Schreibweise in der Überschiebung mit einem anderen Tensor die Metrik wie ein Einheitstensor wirkt, d. h., den an der jeweiligen Operation beteiligten Tensor nicht verändert (jedoch dessen Koordinaten), wird hier und im Weiteren die Metrik nur angegeben, wo sie als Einzelsymbol auftritt.

$$\begin{aligned} a(\boldsymbol{U},\theta\,;\Delta\boldsymbol{U},\boldsymbol{V}) \;&=\; \hat{f}(\boldsymbol{U},\theta\,;\boldsymbol{V}) \qquad\qquad - b(\boldsymbol{U},\theta\,;\Delta\theta,\boldsymbol{V})|_{\theta,\Delta\theta=\mathrm{const}} \\ c(\boldsymbol{U},\theta\,;\Delta\theta,\dot{\theta}_n,\vartheta) \;&=\; \hat{g}(\boldsymbol{U},\theta\,;\theta,\theta_n,\dot{\theta}_n,\vartheta) - d(\boldsymbol{U},\theta\,;\Delta\boldsymbol{U},\dot{\theta}_n,\vartheta)|_{U,\Delta U=\mathrm{const}} \end{aligned} \tag{155}$$

im Zeitschritt mehrmals separat nacheinander gelöst, bis sowohl die Verschiebungs- als auch die Temperaturlösung eine vorgegebene Genauigkeit erreicht haben.

Im Allgemeinen wird bei der partitionierten Vorgehensweise der mechanische Teilschritt jeweils als isotherm betrachtet. Es ist zu erwarten, dass die fehlende Anpassung der Variablen aus dem einen Teilschritt im jeweils anderen zu einer Reihe notwendiger Wiederholungen der entkoppelten Probleme innerhalb des Zeitschritts führen. Dadurch wird die Effizienz des Gesamtsystems geschmälert. Zudem wird in der Literatur die isotherm entkoppelte Vorgehensweise allgemein als nur bedingt stabil angesehen. Daraus kann eine ebenfalls ineffiziente Verkleinerung der Zeitschritte resultieren. Als Alternative zur Verbesserung des Konvergenzverhaltens bei entkoppelter Lösung des thermoelastoplastischen Problems wird in der Literatur eine adiabatische Behandlung des strukturmechanischen Teilproblems angegeben. Dabei erfolgt während der Iterationen zur Erfüllung der Gleichgewichtsbedingungen eine Anpassung der Temperatur allein auf Grundlage der Veränderungen des Wärmehaushalts des Körpers durch die jeweils angepassten mechanischen Einflussfaktoren. Diese Vorgehensweise lässt sich jedoch physikalisch nicht besser als die isotherme motivieren und ist programmtechnisch deutlich aufwändiger. Wegen der Komplexität des Materialmodells und der daraus resultierenden konsistenten Teilmatrizen des linearisierten Gleichungssystems wird somit zunächst die isotherme Betrachtungsweise des strukturmechanischen Teilproblems favorisiert.

6 Zusammenfassung und Ausblick

Bei einer Vielzahl praxisrelevanter Prozesse kann eine gegenseitige Beeinflussung mechanischer und thermischer Felder, teilweise unter Beteiligung weiterer Abläufe (z. B. chemischer oder elktromagnetischer), registriert werden. Als repräsentative Beispiele seien Umformverfahren (speziell inkrementelle Prozeduren – hier laufen in der Regel rein thermomechanische Vorgänge ab) oder chemisch-physikalische Vorgänge in Mehrphasenmedien genannt. Letztere treten u. A. in Mehrkomponentenklebstoffen, Knochenzementen oder Versatzmaterialien zum Verschluss geologischer Salzformationen auf. Während die Temperaturabhängigkeit mechanischer Stoffeigenschaften bereits seit langem in entsprechenden numerischen Simulationen Berücksichtigung findet und relativ problemlos zu handhaben ist, stellt die

5.3 Alternativen zur Behandlung der gekoppelten Aufgabe

Mit den Beziehungen (143a), (143b) liegt unter Berücksichtigung der oben formulierten Einzelfunktionale ein schwach gekoppeltes, unsymmetrisches lineares Problem der finiten Thermoelastoplastizität vor, dessen Lösung von vielen Autoren als numerisch außerordentlich anspruchsvoll und häufig instabil beschrieben wird. Hierzu trägt auch bei, dass die entsprechenden Differentialgleichungen unterschiedlichen Typs sind (mechanisches Teilproblem – elliptische Gleichung, Temperaturteilproblem – parabolischer Ansatz). Die Kopplungseffekte haben ihre Ursache in

- der Temperaturabhängigkeit von Materialparametern der strukturmechanischen konstitutiven Beziehungen und
- der Wärmedehnung

bezüglich des mechanischen Teilproblems sowie in

- der Temperaturabhängigkeit von Materialparametern der konstitutiven Beziehungen und der Randbedingungen für die Wärmeleitungsgleichung,
- dem thermoelastischen Effekt,
- der gesamten plastischen Spannungsleistung und
- dem als innere Energie gespeicherten Anteil der plastischen Spannungsleistung

die mechanischen Kopplungseffekte in der Wärmeleitungsgleichung betreffend.

Die vollständige Kopplung des thermomechanischen Feldproblems (*monolithische* Lösungsstrategie) erfordert eingehende Untersuchungen zu geeigneten Elementansätzen, effektiven Solverstrategien und stabilen Lösungsalgorithmen für das gekoppelte Randwertproblem. Alternativ bietet sich zur vollständigen Kopplung eine gestaffelte, iterativ entkoppelte Vorgehensweise an (*partitionierte* Lösungsstrategie – *staggered scheme*). Dabei werden das Strukturmechanik- und das Wärmeleitproblem unter Berücksichtigung der jeweiligen Kopplungseffekte separat nacheinander gelöst. Die Reihenfolge der Lösung der Teilprobleme ist dabei unerheblich. Da jedoch für die meisten Materialklassen der Einfluss von Veränderungen des Temperaturfeldes auf die Entwicklung mechanischer Felder größer ist als umgekehrt, wird in der Regel mit der Modellierung der Verschiebungsfelder bei konstanter Temperatur begonnen. Die ermittelten strukturmechanischen Zustände werden ihrerseits im nachfolgenden Wärmeleitproblem als konstant berücksichtigt. Mit dem so berechneten neuen Temperaturfeld wird die Lösung des mechanischen Problems verbessert, ohne die Strukturrandbedingungen zu ändern. Danach erfolgt eine erneute Anpassung des Temperaturfeldes im betrachteten Zeitschritt. Dabei werden das über die Beziehungen (143a), (143b) gekoppelte Strukturmechanik- und das Wärmeleitproblem unter Berücksichtigung der jeweiligen Kopplungseffekte mit den Gleichungssystemen

3.2 Hyperelastisches Teildeformationsgesetz

Ausgangspunkt der Herleitung thermodynamisch konsistenter konstitutiver Beziehungen sind

- der 1. Hauptsatz der Thermodynamik in der lokalen Formulierung auf der Ausgangskonfiguration

$$\dot{\epsilon} = \frac{1}{2\varrho_0}\boldsymbol{T} \cdot\cdot \dot{\boldsymbol{C}} - \frac{1}{\varrho_0}\operatorname{Div}\boldsymbol{Q} + H \tag{20}$$

  mit dem Tensor der 2. Piola-Kirchhoff-Spannungen $\boldsymbol{T}$, der Massedichte ϱ_o, der spezifischen inneren Energie ϵ je Masseeinheit, dem Wärmeflussvektor $\boldsymbol{Q}$ je Flächen- und Zeiteinheit sowie den Wärmequellen H je Masse- und Zeiteinheit,
- der 2. Hauptsatz der Thermodynamik in der lokalen Formulierung auf der Ausgangskonfiguration

$$\dot{\eta} + \frac{1}{\varrho_0}\operatorname{Div}\frac{\boldsymbol{Q}}{\theta} - \frac{H}{\theta} \geq 0 \tag{21}$$

  mit der spezifischen Entropie η je Masseeinheit und
- die freie Helmholtz-Energiedichte ψ mit der Definition

$$\psi = \epsilon - \theta\,\eta\,. \tag{22}$$

Aus der Verknüpfung dieser Beziehungen resultiert die so genannte *Clausius-Duhem-Ungleichung* in der Ausgangskonfiguration

$$-\varrho_0\dot{\psi} + \frac{1}{2}\boldsymbol{T} \cdot\cdot \dot{\boldsymbol{C}} - \varrho_0\dot{\theta}\,\eta - \frac{\boldsymbol{Q}\operatorname{Grad}\theta}{\theta} \geq 0\,, \tag{23}$$

deren konsistente Auswertung im Zusammenhang mit geeigneten Ansätzen für ψ auf die konstitutiven Beziehungen einschließlich der Entwicklungsgleichungen des mechanischen und des thermische Problems führt.

Mit der Definition einer symmetrischen zweistufigen tensoriellen inneren Variablen $\widehat{\boldsymbol{A}}_1$ und einer schiefsymmetrischen zweistufigen tensoriellen inneren Variablen $\widehat{\boldsymbol{A}}_2$ auf der Substrukturkonfiguration wird, entsprechend der multiplikativen Aufspaltung des Deformationsgradienten, eine additive Zerlegung der freien Helmholtz-Energiedichte in einzelne konstitutive Anteile vorgeschlagen.

$$\psi = \breve{\psi}_e\left(\breve{\boldsymbol{E}}^e, \theta\right) + \psi_p\left(\widehat{\boldsymbol{A}}_1, \widehat{\boldsymbol{A}}_2, \theta\right) + \psi_\theta\left(\theta\right) \tag{24}$$

Dabei bezeichnet $\breve{\psi}_e$ den elastischen Anteil der freien Energie, der vom elastischen Verzerrungstensor sowie der Temperatur abhängt und ψ_p den plastischen Anteil der freien Energie, der in mechanische Arbeit umgewandelt werden kann und von den inneren Variablen $\widehat{\boldsymbol{A}}_1$, $\widehat{\boldsymbol{A}}_2$ vom Verzerrungstyp sowie ebenfalls der

Temperatur abhängt. In beiden Anteilen wird mit θ temperaturabhängiges Materialverhalten beschrieben. Zusätzlich enthält $\breve{\psi}_e$ einen Anteil, der die Wärmedehnungen betrifft. Die Definition des elastischen Anteils der freien Helmholtz-Energiedichte laut (24) erfasst lediglich isotrop elastisches Materialverhalten. Mit ψ_θ wird der Anteil an Wärmeenergie erfasst, der wesentlich die spezifische Wärmekapazität bei konstanten Deformationen kennzeichnet. Auf alle Anteile der freien Helmholtz-Energiedichte wird später ausführlicher eingegangen.

Wie oben erwähnt, sollen wegen der bevorzugten materiellen Beschreibung der thermomechanischen Prozesse die konstitutiven Beziehungen konsequent auf der Ausgangskonfiguration formuliert werden. Zu diesem Zweck werden die Anteile $\breve{\psi}_e$ und ψ_p der freien Helmholtz-Energiedichte zunächst als isotrope Tensorfunktionen beispielsweise in den Invarianten der unabhängigen Variablen in ihren jeweils relevanten (Zwischen)Konfigurationen zu definieren. Für ihre Darstellung in materiellen Größen erfolgt anschließend ein pull-back auf die Ausgangskonfiguration. Im Folgenden soll diese Vorgehensweise am Beispiel der ersten Grundinvariante des elastischen Verzerrungstensors $\breve{\boldsymbol{E}}^e$ (formuliert auf der thermischen Zwischenkonfiguration) demonstriert werden.

$$
\begin{aligned}
J_1(\breve{\boldsymbol{E}}^e) &= \frac{1}{2}\,\breve{\boldsymbol{C}}^e \cdot\cdot\, \breve{\boldsymbol{G}}^{-1} - \frac{1}{2}\,\breve{\boldsymbol{G}} \cdot\cdot\, \breve{\boldsymbol{G}}^{-1} \\
&= \frac{1}{2}\,\boldsymbol{F}^{\theta-\mathrm{T}}\boldsymbol{F}^{\theta\mathrm{T}}\breve{\boldsymbol{C}}^e\boldsymbol{F}^{\theta}\boldsymbol{F}^{\theta-1} \cdot\cdot\, \breve{\boldsymbol{G}}^{-1} - \frac{3}{2} \\
&= \frac{1}{2}\,\boldsymbol{F}^{\theta\mathrm{T}}\breve{\boldsymbol{C}}^e\boldsymbol{F}^{\theta} \cdot\cdot\, \boldsymbol{F}^{\theta-1}\breve{\boldsymbol{G}}^{-1}\boldsymbol{F}^{\theta-\mathrm{T}} - \frac{3}{2} \\
&= \frac{1}{2}\,\widetilde{\boldsymbol{C}}^{\theta e} \cdot\cdot\, \widetilde{\boldsymbol{C}}^{\theta-1} - \frac{3}{2} \\
&= \frac{1}{2}\,\boldsymbol{F}^{p-\mathrm{T}}\boldsymbol{F}^{p\mathrm{T}}\widetilde{\boldsymbol{C}}^{\theta e}\boldsymbol{F}^{p}\boldsymbol{F}^{p-1} \cdot\cdot\, \widetilde{\boldsymbol{C}}^{\theta-1} - \frac{3}{2} \\
&= \frac{1}{2}\,\boldsymbol{F}^{p\mathrm{T}}\widetilde{\boldsymbol{C}}^{\theta e}\boldsymbol{F}^{p} \cdot\cdot\, \boldsymbol{F}^{p-1}\widetilde{\boldsymbol{C}}^{\theta-1}\boldsymbol{F}^{p-\mathrm{T}} - \frac{3}{2} \\
&= \frac{1}{2}\,\boldsymbol{C} \cdot\cdot\, \boldsymbol{C}^{p\theta-1} - \frac{3}{2} \\
&= \frac{1}{2}\,\boldsymbol{C}\boldsymbol{C}^{p\theta-1} \cdot\cdot\, \boldsymbol{I} - \frac{3}{2} \\
&= \frac{1}{2}\,\boldsymbol{C}^e \cdot\cdot\, \boldsymbol{I} - \frac{3}{2}
\end{aligned}
\tag{25}
$$

Damit ist gleichzeitig das pull-back des elastischen Strecktensors vom Rechts-Cauchy-Green-Typ (16) in die Ausgangskonfiguration definiert.

$$
\boldsymbol{C}^e = \boldsymbol{C}\boldsymbol{C}^{p\theta-1} \tag{26}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial w_e}{\partial \boldsymbol{E}} &= \theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left[\frac{\varphi^2}{2}\left(\frac{d\boldsymbol{T}}{d\boldsymbol{E}}\boldsymbol{C}^p - 2\,\boldsymbol{T}\boldsymbol{C}^p\frac{d\boldsymbol{C}^{p-1}}{d\boldsymbol{C}}\boldsymbol{C}^p\right)\right] \cdot\cdot\, \dot{\boldsymbol{C}}^{e\mathrm{T}} \\
&\quad - \frac{\theta}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\left[2\frac{\partial\boldsymbol{T}}{\partial\boldsymbol{C}^e} + \boldsymbol{C} \cdot\cdot\, \frac{\partial}{\partial\boldsymbol{C}^e}\left(\frac{d\boldsymbol{T}}{d\boldsymbol{E}}\right)\right] \cdot\cdot\, \dot{\boldsymbol{C}}^{e\mathrm{T}} \\
&\quad - \frac{\theta}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\left[\frac{d\boldsymbol{T}}{d\boldsymbol{E}}\boldsymbol{C}^{p\theta} - 2\,\varphi^2\,\boldsymbol{T}\boldsymbol{C}^p\frac{d\boldsymbol{C}^{p-1}}{d\boldsymbol{C}}\boldsymbol{C}^p\right] \cdot\cdot\, \dot{\boldsymbol{C}}^{e\mathrm{T}} \\
&\quad + \frac{2\theta}{\alpha\Delta t}\left[\frac{\partial^2(\varrho_0\bar{\psi}_e)}{\partial\boldsymbol{C}^e\partial\theta} - \frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\left(\boldsymbol{C} \cdot\cdot\, \frac{\partial\boldsymbol{T}}{\partial\boldsymbol{C}^e} + \boldsymbol{T}\boldsymbol{C}^{p\theta}\right)\right] \cdot\cdot\, \frac{d\boldsymbol{C}^{e\mathrm{T}}}{d\boldsymbol{C}}
\end{aligned}
\tag{153a}
$$

$$
\text{mit} \qquad \frac{\partial(\varrho_0\bar{\psi}_e)}{\partial\boldsymbol{C}^e} = \frac{\varphi^2}{2}\,\boldsymbol{T}\boldsymbol{C}^p
$$

$$
\begin{aligned}
\text{und} \qquad \frac{\partial}{\partial\boldsymbol{C}^e}\left(\frac{d\boldsymbol{T}}{d\boldsymbol{E}}\right) &= 2\,\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{C}^e}\left(\frac{d\boldsymbol{T}}{d\boldsymbol{C}}\right) \\
&= \frac{2}{\varphi^2}\,\frac{\partial^3(\varrho_0\bar{\psi}_e)}{\partial\boldsymbol{C}^e\partial\boldsymbol{C}^e\partial\boldsymbol{C}^e}\frac{d\boldsymbol{C}^{e\mathrm{T}}}{d\boldsymbol{C}} + \frac{2}{\varphi^2}\,\frac{\partial^2(\varrho_0\bar{\psi}_e)}{\partial\boldsymbol{C}^e\partial\boldsymbol{C}^e}\frac{d\boldsymbol{C}^{p-1}}{d\boldsymbol{C}}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial w_p}{\partial \boldsymbol{E}} &= \left(\boldsymbol{C}^p\frac{d\boldsymbol{T}}{d\boldsymbol{C}}\boldsymbol{C} + \boldsymbol{C}^p\boldsymbol{T}\,\underset{\boldsymbol{4}}{\boldsymbol{I}}\right) \cdot\cdot\, \dot{\boldsymbol{C}}^{p-1} \\
&\quad - \boldsymbol{C}^p\frac{d\boldsymbol{C}^{p-1}}{d\boldsymbol{C}}\boldsymbol{C}^p\boldsymbol{T}\boldsymbol{C} \cdot\cdot\, \dot{\boldsymbol{C}}^{p-1} \\
&\quad + \frac{1}{\alpha\,\Delta t}\,\boldsymbol{C}^p\boldsymbol{T}\boldsymbol{C} \cdot\cdot\, \frac{d\boldsymbol{C}^{p-1}}{d\boldsymbol{C}}
\end{aligned}
\tag{153b}
$$

$$
\text{mit} \qquad I_{ijkl} = \delta_{ik}\delta_{jl}
$$

Zur Vervollständigung der Beziehung (153a) wird die Gleichung

$$
\frac{d\boldsymbol{C}^{e\mathrm{T}}}{d\boldsymbol{C}} \underset{(28)}{=} \frac{1}{\varphi^2}\left(\boldsymbol{C}^{p-1}\,\underset{\boldsymbol{4}}{\boldsymbol{I}} + \frac{d\boldsymbol{C}^{p-1}}{d\boldsymbol{C}}\boldsymbol{C}\right) \tag{154}
$$

benötigt.

Alle oben in ihrer grundlegenden Struktur aufgeführten konsistenten Ableitungen sind für jedes konkrete Materialmodell unter Berücksichtigung der speziellen Materialfunktionen und besonders der Temperaturabhängigkeiten jeweils individuell auszuwerten.

Deutlich komplexer gestalten sich zum Teil die Ableitungen der Anteile der spezifischen Wärmekapazität sowie der thermomechanischen Koppelgröße nach dem Tensor der Gesamtverzerrungen.

$$\frac{\partial c_{\theta m}}{\partial \boldsymbol{E}} = \theta \frac{\partial}{\partial \theta}\left[\frac{1}{\varphi}\frac{\partial \varphi}{\partial \theta}\left(\boldsymbol{C} \cdot\cdot \frac{d\boldsymbol{T}}{d\boldsymbol{E}} + 2\,\boldsymbol{T}\right)\right] \tag{150a}$$

$$\frac{\partial c_{\theta t}}{\partial \boldsymbol{E}} = \boldsymbol{0} \tag{150b}$$

$$\frac{\partial w_v}{\partial \boldsymbol{E}} = \begin{matrix}\boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{4}\end{matrix} \tag{150c}$$

Für die partiellen Ableitungen von w_e und w_p nach dem Greenschen Verzerrungstensor $\boldsymbol{E}$ werden u. a. die Ableitungen der jeweils aktuellen Werte (aus der Lösung des Anfangswertproblems in der momentan betrachteten Gleichgewichtsiteration bekannt) von $\dot{\boldsymbol{C}}^{e\mathrm{T}}$ sowie $\dot{\boldsymbol{C}}^{p-1}$ nach $\boldsymbol{E}$ benötigt. Unter Verwendung des Zeitdiskretisierungsverfahrens (128) gilt:

$$\dot{\boldsymbol{C}}^{e\mathrm{T}}_{t+\Delta t} = \left[\left(\boldsymbol{C}^e_t + \Delta \boldsymbol{C}^e\right)^{\mathrm{T}}\right]^{\cdot} = \frac{1}{\alpha\,\Delta t}\,\Delta \boldsymbol{C}^{e\mathrm{T}} - \frac{1-\alpha}{\alpha}\,\dot{\boldsymbol{C}}^{e\mathrm{T}}_t \tag{151a}$$

$$\dot{\boldsymbol{C}}^{p-1}_{t+\Delta t} = \left(\boldsymbol{C}^{p-1}_t + \Delta \boldsymbol{C}^{p-1}\right)^{\cdot} = \frac{1}{\alpha\,\Delta t}\,\Delta \boldsymbol{C}^{p-1} - \frac{1-\alpha}{\alpha}\,\dot{\boldsymbol{C}}^{p-1}_t \tag{151b}$$

Hierbei sind $\Delta \boldsymbol{C}^{e\mathrm{T}} = \boldsymbol{C}^{e\mathrm{T}}_{t+\Delta t} - \boldsymbol{C}^{e\mathrm{T}}_t$ und $\Delta \boldsymbol{C}^{p-1} = \boldsymbol{C}^{p-1}_{t+\Delta t} - \boldsymbol{C}^{p-1}_t$ als die Differenzen der jeweiligen Variablen in der aktuellen Gleichgewichtsiteration und dem vorhergehenden Lastschritt definiert. Da die Aufspaltung in die elastischen und plastischen Teilverzerrungsmaße des bereits beendeten Lastschritts unabhängig von den aktuellen Gesamtverzerrungen vollzogen wurde, gilt:

$$\frac{d\dot{\boldsymbol{C}}^{e\mathrm{T}}}{d\boldsymbol{C}} = \frac{d\dot{\boldsymbol{C}}^{e\mathrm{T}}_{t+\Delta t}}{d\boldsymbol{C}} = \frac{1}{\alpha\,\Delta t}\frac{d\boldsymbol{C}^{e\mathrm{T}}_{t+\Delta t}}{d\boldsymbol{C}} = \frac{1}{\alpha\,\Delta t}\frac{d\boldsymbol{C}^{e\mathrm{T}}}{d\boldsymbol{C}} \tag{152a}$$

$$\frac{d\dot{\boldsymbol{C}}^{p-1}}{d\boldsymbol{C}} = \frac{d\dot{\boldsymbol{C}}^{p-1}_{t+\Delta t}}{d\boldsymbol{C}} = \frac{1}{\alpha\,\Delta t}\frac{d\boldsymbol{C}^{p-1}_{t+\Delta t}}{d\boldsymbol{C}} = \frac{1}{\alpha\,\Delta t}\frac{d\boldsymbol{C}^{p-1}}{d\boldsymbol{C}} \tag{152b}$$

Im Weiteren wird auf die Kennzeichnung des aktuellen Zeitpunktes durch den Index $t+\Delta t$ wieder verzichtet. Unter Beachtung obiger Überlegungen ergibt sich für die noch ausstehenden Ableitungen:

Obwohl es sich um ein elastisches Verzerrungsmaß handelt, enthält es auf der Ausgangskonfiguration auch plastische und thermische Anteile. Mit

$$\boldsymbol{C}^{p\theta-1} = \boldsymbol{F}^{p-1}\boldsymbol{F}^{\theta-1}\boldsymbol{F}^{\theta-\mathrm{T}}\boldsymbol{F}^{p-\mathrm{T}} \tag{27}$$

und (19) vereinfacht sich diese Beziehung.

$$\boldsymbol{C}^e = \frac{1}{\varphi^2}\,\boldsymbol{C}\boldsymbol{C}^{p-1} \tag{28}$$

Zu (25) analoge Beziehungen können für die weiteren Invarianten von $\check{\boldsymbol{E}}^e$ abgeleitet werden (eine ausführliche Darstellung für den isothermen elastisch-plastischen Fall ist in [3] angegeben). Folglich lässt sich der elastische Anteil der freien Helmholtz-Energiedichte als eine (von $\check{\psi}_e$ verschiedene) Funktion des elastischen Strecktensors in materieller Darstellung sowie der Temperatur formulieren.

$$\psi = \bar{\psi}_e\left(\boldsymbol{C}\boldsymbol{C}^{p\theta-1}, \theta\right) + \psi_p\left(\widehat{\boldsymbol{A}}_1, \widehat{\boldsymbol{A}}_2, \theta\right) + \psi_\theta\left(\theta\right) \tag{29}$$

Die für die Auswertung der Clausius-Duhem-Ungleichung benötigte materielle Zeitableitung der freien Helmholtz-Energiedichte lautet somit:

$$\begin{aligned}\dot{\psi} = {} & \frac{\partial \bar{\psi}_e}{\partial\left(\boldsymbol{C}\boldsymbol{C}^{p\theta-1}\right)} \cdot\cdot \left[\left(\boldsymbol{C}\boldsymbol{C}^{p\theta-1}\right)^{\cdot}\right]^{\mathrm{T}} \\ & + \frac{\partial \psi_p}{\partial \widehat{\boldsymbol{A}}_1} \cdot\cdot \dot{\widehat{\boldsymbol{A}}}_1{}^{\mathrm{T}} + \frac{\partial \psi_p}{\partial \widehat{\boldsymbol{A}}_2} \cdot\cdot \dot{\widehat{\boldsymbol{A}}}_2{}^{\mathrm{T}} \\ & + \frac{\partial \psi}{\partial \theta}\,\dot{\theta}\,.\end{aligned} \tag{30}$$

In der partiellen Ableitung des letzten Terms nach θ sind die expliziten Abhängigkeiten aller Anteile der freien Helmholtz-Energiedichte von der Temperatur zusammengefasst. Die materielle Zeitableitung des elastischen Strecktensors muss unter Berücksichtigung von (28) weiter aufgegliedert werden.

$$\begin{aligned}\left[\left(\boldsymbol{C}\boldsymbol{C}^{p\theta-1}\right)^{\cdot}\right]^{\mathrm{T}} &= \left[\dot{\boldsymbol{C}}\boldsymbol{C}^{p\theta-1} + \boldsymbol{C}\dot{\boldsymbol{C}}^{p\theta-1}\right]^{\mathrm{T}} \\ &= \left[\dot{\boldsymbol{C}}\boldsymbol{C}^{p\theta-1} + \frac{1}{\varphi^2}\,\boldsymbol{C}\dot{\boldsymbol{C}}^{p-1} - \frac{2}{\varphi^3}\frac{\partial \varphi}{\partial \theta}\,\boldsymbol{C}\boldsymbol{C}^{p-1}\,\dot{\theta}\right]^{\mathrm{T}} \\ &= \boldsymbol{C}^{p\theta-1}\dot{\boldsymbol{C}} + \frac{1}{\varphi^2}\,\dot{\boldsymbol{C}}^{p-1}\boldsymbol{C} - \frac{2}{\varphi^3}\frac{\partial \varphi}{\partial \theta}\,\boldsymbol{C}^{p-1}\boldsymbol{C}\,\dot{\theta}\end{aligned} \tag{31}$$

Nach Einsetzen von (30) in die Clausius-Duhem-Ungleichung (23) ergibt sich unter Berücksichtigung von (31) sowie einigen zweckmäßigen Umformungen eine

Beziehung zur Formulierung von Evolutionsgleichungen für einige Teilprozesse der betrachteten finiten Thermoelastoplastizität.

$$
\begin{aligned}
-\varrho_0 \frac{\partial \psi_p}{\partial \widehat{\boldsymbol{A}}_1} \cdot\cdot\, \dot{\widehat{\boldsymbol{A}}}_1 + \varrho_0 \frac{\partial \psi_p}{\partial \widehat{\boldsymbol{A}}_2} \cdot\cdot\, \dot{\widehat{\boldsymbol{A}}}_2 - \varrho_0 \frac{1}{\varphi^2}\, \boldsymbol{C}\, \frac{\partial \bar{\psi}_e}{\partial \left(\boldsymbol{C}\boldsymbol{C}^{p\theta-1}\right)} \cdot\cdot\, \dot{\boldsymbol{C}}^{p-1} \\
- \left\{ \varrho_0 \frac{\partial \bar{\psi}_e}{\partial \left(\boldsymbol{C}\boldsymbol{C}^{p\theta-1}\right)} \boldsymbol{C}^{p\theta-1} - \frac{1}{2}\boldsymbol{T} \right\} \cdot\cdot\, \dot{\boldsymbol{C}} \\
-\varrho_0 \left\{ \eta + \frac{\partial \psi}{\partial \theta} - \frac{2}{\varphi^3}\frac{\partial \varphi}{\partial \theta} \frac{\partial \bar{\psi}_e}{\partial \left(\boldsymbol{C}\boldsymbol{C}^{p\theta-1}\right)} \boldsymbol{C}^{p-1} \cdot\cdot\, \boldsymbol{C} \right\} \dot{\theta} \\
- \frac{\boldsymbol{Q}\, \mathrm{Grad}\, \theta}{\theta} \;\geq\; 0 \qquad (32)
\end{aligned}
$$

Die Ungleichung (32) stellt einen komplexen Ausdruck dar, der in unterschiedlicher Weise erfüllt werden kann. Sie behält auch dann ihre uneingeschränkte Gültigkeit, wenn aus Gründen physikalischer Plausibilität für einzelne Anteile angenommen wird, dass sie für sich genommen nicht negativ oder gleich Null sind. So kann beispielsweise aus der separaten Betrachtung reversibler isothermer elastischer Prozesse (hier gilt das Gleichheitszeichen in (23)) abgeleitet werden, dass der Ausdruck in der zweiten Zeile von (32) für beliebige Deformationsvorgänge den Wert Null besitzt. Daraus folgt die explizite Spannungs-Verzerrungs-Beziehung der Hyperelastizität.

$$
\boldsymbol{T} \;=\; 2\,\varrho_0\, \frac{\partial \bar{\psi}_e}{\partial \left(\boldsymbol{C}\boldsymbol{C}^{p\theta-1}\right)} \boldsymbol{C}^{p\theta-1} \;\underset{(19)}{=}\; \frac{2}{\varphi^2}\,\varrho_0\, \frac{\partial \bar{\psi}_e}{\partial \left(\boldsymbol{C}\boldsymbol{C}^{p\theta-1}\right)} \boldsymbol{C}^{p-1} \qquad (33)
$$

Unter der Annahme, dass $\bar{\psi}_e$ in den Invarianten von $\boldsymbol{C}\boldsymbol{C}^{p\theta-1}$ formuliert wird, gilt beispielsweise für die erste Grundinvariante (25):

$$
\begin{aligned}
J_1(\boldsymbol{C}\boldsymbol{C}^{p\theta-1}) \;&=\; \boldsymbol{C}\boldsymbol{C}^{p\theta-1} \cdot\cdot\, \boldsymbol{I} \;=\; \boldsymbol{C} \cdot\cdot\, \boldsymbol{C}^{p\theta-1} \\
\Rightarrow\quad \frac{\partial J_1}{\partial \left(\boldsymbol{C}\boldsymbol{C}^{p\theta-1}\right)} \boldsymbol{C}^{p\theta-1} \;&=\; \boldsymbol{C}^{p\theta-1} \qquad (34a) \\
\frac{\partial J_1}{\partial \boldsymbol{C}} \;&=\; \boldsymbol{C}^{p\theta-1} \qquad (34b)
\end{aligned}
$$

Eine ausführliche Darstellung analoger Ableitungen bezüglich aller Invarianten und der Auswirkungen auf die Gesamtfunktion $\bar{\psi}_e$ für den isothermen elastisch-plastischen Fall findet sich wiederum in [3]. Im Ergebnis kann die Beziehung (33) wesentlich vereinfacht in Form der klassischen isothermen Hyperelastizität dargestellt werden.

$$
\boldsymbol{T} \;=\; 2\,\varrho_0\, \frac{\partial \bar{\psi}_e}{\partial \boldsymbol{C}} \;=\; 2\, \frac{\partial \left(\varrho_0 \bar{\psi}_e\right)}{\partial \boldsymbol{C}} \;=\; 2\, \frac{\partial \psi_e}{\partial \boldsymbol{C}} \qquad (35)
$$

Es folgt die konsistente Materialmatrix in der Form:

$$
\frac{d\boldsymbol{T}}{d\boldsymbol{E}} = 2\frac{d\boldsymbol{T}}{d\boldsymbol{C}} = 4\frac{\partial^2 \psi_e}{\partial \boldsymbol{C}\, \partial \boldsymbol{C}} \;+\; 4\frac{\partial^2 \psi_e}{\partial \boldsymbol{C}\, \partial \boldsymbol{C}^{p-1}} \cdot\cdot\, \frac{d\boldsymbol{C}^{p-1}}{d\boldsymbol{C}}\,. \qquad (146)
$$

Für die Berechnung des vierstufigen Tensors $d\boldsymbol{C}^{p-1}/d\boldsymbol{C}$ wird das (zuvor nach der Zeit diskretisierte) System (65a)-(65d) implizit bezüglich des Rechts-Cauchy-Green-Tensors $\boldsymbol{C}$ differenziert. Eine ausführliche Darstellung ist in [3] enthalten.

Werden die kinematischen unabhängigen Variablen als konstant angenommen und die Ableitung des Spannungstensors nach der Temperatur betrachtet, folgt aus

$$
d\boldsymbol{T} = 2\frac{\partial^2 \psi_e}{\partial \boldsymbol{C}\, \partial \theta}\, d\theta \qquad (147)
$$

die Beziehung

$$
\frac{d\boldsymbol{T}}{d\theta} \;=\; \frac{\partial \boldsymbol{T}}{\partial \theta} \;=\; 2\frac{\partial^2 \psi_e}{\partial \boldsymbol{C}\, \partial \theta}\,. \qquad (148)
$$

Die erforderlichen Ableitungen der Anteile der spezifischen Wärmekapazität c_θ (101) sowie der thermomechanischen Koppelgröße w_m mit den Beiträgen (102)-(104) nach der Temperatur sollen im Folgenden lediglich in ihrer prinzipiellen Struktur angegeben werden.

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial c_{\theta m}}{\partial \theta} \;&=\; \frac{1}{\theta}\, c_{\theta m} \;+\; \theta\, \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \left(\frac{1}{\varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial \theta}\, \boldsymbol{T} \cdot\cdot\, \boldsymbol{C} \right) \qquad (149a) \\
\frac{\partial c_{\theta t}}{\partial \theta} \;&=\; \frac{1}{\theta}\, c_{\theta t} \;-\; \theta\, \frac{\partial^3 (\varrho_0 \psi)}{\partial \theta^3} \qquad (149b) \\
\frac{\partial w_e}{\partial \theta} \;&=\; \frac{1}{\theta}\, w_e \;+\; \theta \frac{\partial^3 (\varrho_0 \bar{\psi}_e)}{\partial \boldsymbol{C}^e \partial \theta^2} \cdot\cdot\, \dot{\boldsymbol{C}}^{e\mathrm{T}} \\
&\quad - \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\frac{1}{\varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial \theta} \left(\boldsymbol{C} \cdot\cdot\, \frac{\partial \boldsymbol{T}}{\partial \boldsymbol{C}^e} + \boldsymbol{T}\boldsymbol{C}^{p\theta} \right) \right] \cdot\cdot\, \dot{\boldsymbol{C}}^{e\mathrm{T}} \qquad (149c) \\
\frac{\partial w_p}{\partial \theta} \;&=\; -\frac{1}{2} \frac{\partial \left(\varphi^2\, \boldsymbol{T}\right)}{\partial \theta} \boldsymbol{C}^e \cdot\cdot\, \dot{\boldsymbol{C}}^p \qquad (149d) \\
\frac{\partial w_v}{\partial \theta} \;&=\; -\theta\, \frac{\partial^2 \boldsymbol{\alpha}}{\partial \theta^2} \cdot\cdot\, \overset{\triangle}{\boldsymbol{A}}_1 \;-\; \theta\, \frac{\partial^2 \boldsymbol{T}^p}{\partial \theta^2} \cdot\cdot\, \overset{\triangle}{\boldsymbol{A}}_2 \qquad (149e)
\end{aligned}
$$

Da sich die inneren Variablen zur Beschreibung des Verfestigungsverhaltens im thermoelastischen Bereich nicht entwickeln dürfen, wird im plastischen Anteil der freien Energiedichtefunktion nur die Temperaturabhängigkeit der Materialparameter berücksichtigt.

$$
\begin{aligned}
d(\boldsymbol{U}\,,\theta\,;\Delta\boldsymbol{U}\,,\dot{\theta}_n,\vartheta) \;&=\; \alpha\,\Delta t\,d_{23}(\boldsymbol{U}\,,\theta\,;\Delta\boldsymbol{U}\,,\vartheta)\\
&\quad -(1-\alpha)\,\Delta t\,d_{21}(\boldsymbol{U}\,,\theta\,;\Delta\boldsymbol{U}\,,\dot{\theta}_n,\vartheta) \qquad (144\mathrm{d})\\
c(\boldsymbol{U}\,,\theta\,;\Delta\theta,\dot{\theta}_n,\vartheta) \;&=\; d_{01}(\boldsymbol{U}\,,\theta\,;\Delta\theta,\vartheta)+c_{01}(\theta\,;\Delta\theta,\vartheta)+\alpha\,\Delta t\,c_{02}(\Delta\theta,\vartheta)\\
&\quad +\alpha\,\Delta t\,d_{24}(\boldsymbol{U}\,,\theta\,;\Delta\theta,\vartheta)\\
&\quad -(1-\alpha)\,\Delta t\,c_{21}(\theta\,;\Delta\theta,\dot{\theta}_n,\vartheta)\\
&\quad -(1-\alpha)\,\Delta t\,d_{22}(\boldsymbol{U}\,,\theta\,;\Delta\theta,\dot{\theta}_n,\vartheta) \qquad (144\mathrm{e})\\
\hat{g}(\boldsymbol{U}\,,\theta\,;\theta,\theta_n,\dot{\theta}_n,\vartheta) \;&=\; \alpha\,\Delta t\,[g(\vartheta)-d_{02}(\boldsymbol{U}\,,\theta\,;\vartheta)-c_{02}(\theta\,,\vartheta)]\\
&\quad -d_{01}(\boldsymbol{U}\,,\theta\,;\theta-\theta_n,\vartheta)-c_{01}(\theta\,;\theta-\theta_n,\vartheta)\\
&\quad +(1-\alpha)\,\Delta t\left[d_{01}(\boldsymbol{U}\,,\theta\,;\dot{\theta}_n,\vartheta)+c_{01}(\theta\,;\dot{\theta}_n,\vartheta)\right]. \qquad (144\mathrm{f})
\end{aligned}
$$

Das System (143a), (143b) stellt eine konsistente Linearisierung der Beziehungen (126a), (126b) dar und impliziert konsequent das Newton-Raphson-Verfahren zu dessen iterativer Lösung im Lastinkrement. Es kann nach Ortsdiskretisierung in geeigneten Ansatzteilräumen $\boldsymbol{U}$, $\boldsymbol{V}\in\mathbb{V}_h^3\subset\mathbb{V}^3$ und θ, $\vartheta\in\mathbb{X}_h\subset\mathbb{X}$ im Rahmen einer gemischten FE-Formulierung gelöst werden. Wie aus den Gleichungen (144a)-(144f) ersichtlich wird, ist dieses System unter Berücksichtigung des verallgemeinerten impliziten Diskretisierungsschemas (131) jedoch in den Blöcken $b(\boldsymbol{U}\,,\theta\,;\Delta\theta,\boldsymbol{V}\,)$ und $d(\boldsymbol{U}\,,\theta\,;\Delta\boldsymbol{U}\,,\dot{\theta}_n,\vartheta)$ nicht symmetrisch. Dieser Systemcharakter erfordert die Verwendung eines geeigneten Gleichungslösers und die Berechnung der materiellen Zeitableitung der Temperatur zum Ende des ausiterierten Lastschritts mit Hilfe der Beziehung (132).

Zum Abschluss der Diskussion des linearisierten gekoppelten thermoelastoplastischen Problems soll lediglich kurz auf die Ermittlung von erforderlichen Ableitungen nach dem Greenschen Verzerrungstensor $\boldsymbol{E}$ und der Temperatur θ eingegangen werden, die in den einzelnen, oben dargestellten Integralen auftreten. Eine ausführliche Analyse würde den Rahmen dieser Publikation sprengen.

Die Formulierung der konsistenten Materialmatrix $d\boldsymbol{T}/d\boldsymbol{E}$ basiert auf der Bildung des Spannungsdifferentials bezüglich der kinematischen unabhängigen Variablen (bei konstanter Temperatur) unter Beachtung des hyperelastischen Teildeformationsgesetzes (35).

$$
d\boldsymbol{T}=2\frac{\partial^2\psi_e}{\partial\boldsymbol{C}\,\partial\boldsymbol{C}}\cdot\cdot\,d\boldsymbol{C}\;+\;\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{C}^{p-1}}\left(2\frac{\partial\psi_e}{\partial\boldsymbol{C}}\right)\cdot\cdot\,d\boldsymbol{C}^{p-1}\,. \qquad (145)
$$

In diesem Zusammenhang wurde zusätzlich angenommen, dass die (konstante) Massedichte ϱ_0 in die Materialkonstanten eingeht.

3.3 Entropie und Wärmeflussvektor

Unter der oben angegebenen Voraussetzung, dass die Ungleichung (32) in unterschiedlicher Weise erfüllt werden kann, wird postuliert, dass der Ausdruck in ihrer dritten Zeile bei beliebigen Temperaturraten ebenfalls den Wert Null besitzt. Es folgt ein Ausdruck für die Entropie, der Wärmeleit- und Deformationsprozesse erfasst.

$$
\eta\;=\;-\,\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\;+\;\frac{2}{\varphi^3}\,\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\,\frac{\partial\bar{\psi}_e}{\partial\left(\boldsymbol{C}\boldsymbol{C}^{p\theta-1}\right)}\boldsymbol{C}^{p-1}\cdot\cdot\,\boldsymbol{C} \qquad (36)
$$

Unter Berücksichtigung der Beziehung (33) folgt daraus:

$$
\eta\;=\;-\,\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\;+\;\frac{1}{\varphi}\,\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\,\frac{1}{\varrho_0}\,\boldsymbol{T}\cdot\cdot\,\boldsymbol{C}\,. \qquad (37)
$$

Nach dem Abspalten von Beziehungen für die Spannung und die Entropie verbleiben in der Clausius-Duhem-Ungleichung (32) lediglich Terme bezüglich dissipativer inelastischer (hier: plastischer) Prozesse und diffusiver Wärmetransportvorgänge im betrachteten Medium. Wird für Letztere die Annahme getroffen, dass

$$
-\,\frac{\boldsymbol{Q}\,\mathrm{Grad}\,\theta}{\theta}\;>\;0 \qquad (38)
$$

gilt, ist die Clausius-Duhem-Ungleichung in ihrer Gesamtheit erfüllt. Die Bedingung (38) wird eingehalten, wenn für den Wärmeflussvektor die Gültigkeit des Fourierschen Wärmeleitgesetzes postuliert wird. Unter Annahme einer isotropen Wärmeausbreitung gilt in der Momentankonfiguration:

$$
\boldsymbol{q}\;=\;-\lambda_H\,\boldsymbol{g}^{-1}\,\mathrm{grad}\,\theta \qquad (39)
$$

mit dem Koeffizienten der Wärmeleitfähigkeit λ_H.

Für die Transformation von (39) auf die Ausgangskonfiguration wird der Wärmefluss durch die Ränder des betrachteten Körpers analysiert. Da die Wärmemenge, die pro Zeiteinheit durch Γ oder Γ_0 fließt, gleich sein muss, gilt:

$$
\int_{\Gamma}\boldsymbol{q}\,\mathfrak{n}\,d\Gamma\;=\;\int_{\Gamma_0}\boldsymbol{Q}\,\mathfrak{N}\,d\Gamma_0\,. \qquad (40)
$$

Hierbei stellen $\mathfrak{n}$ und $\mathfrak{N}$ die jeweils nach außen gerichteten Normalenvektoren auf den Rändern der betrachteten Gebiete entsprechend in der Momentan- bzw.

der Ausgangskonfiguration dar. Nach Anwendung der Nansonschen Formel zur Transformation von Flächenelementen

$$\mathfrak{n}\, d\Gamma \;=\; d\boldsymbol{\Gamma} \;=\; (\det \boldsymbol{F})\, \boldsymbol{F}^{-\mathrm{T}}\, d\boldsymbol{\Gamma}_0 \;=\; J\boldsymbol{F}^{-\mathrm{T}}\, \mathfrak{N}\, d\Gamma_0 \tag{41}$$

auf das Integral bezüglich der Momentankonfiguration folgt mit der Beziehung $\boldsymbol{q}\boldsymbol{F}^{-\mathrm{T}} = \boldsymbol{F}^{-1}\boldsymbol{q}$:

$$J\, \boldsymbol{F}^{-1}\, \boldsymbol{q} \;=\; \boldsymbol{Q}\,. \tag{42}$$

Da weiterhin leicht gezeigt werden kann, dass

$$\boldsymbol{F}^{\mathrm{T}}\, \boldsymbol{g}^k \frac{\partial}{\partial x^k} \;=\; \boldsymbol{G}^K \frac{\partial}{\partial X^K} \tag{43}$$

gilt, ergibt sich das Fouriersche Wärmeleitgesetz auf der Ausgangskonfiguration in folgender Form:

$$\boldsymbol{Q} \;=\; -\lambda_H \sqrt{\det \boldsymbol{C}}\, \boldsymbol{C}^{-1}\, \mathrm{Grad}\, \theta\,. \tag{44}$$

3.4 Plastisches Teildeformationsgesetz

Die Analyse des plastischen Teildeformationsgesetzes auf der Basis eines Substrukturkonzepts ist in [3] für den isothermen Fall ausführlich dargestellt. Wie bereits erwähnt, wird diese Vorgehensweise durch die hier vorgenommene Wahl der multiplikativen Zerlegung des Deformationsgradienten bei Betrachtung thermoelastoplastischer Vorgänge nicht prinzipiell verändert. Daher werden in diesem Abschnitt lediglich die wesentlichen Grundlagen der Definition eines plastischen Teildeformationsgesetzes erläutert und Hinweise auf Spezifika durch die Berücksichtigung von Temperaturprozessen gegeben.

Nach eingehender Betrachtung von Beziehungen für den Spannungstensor, die Entropie und den Wärmeflussvektor verbleibt von der Clausius-Duhem-Ungleichung (32) lediglich ein dissipativer, mechanischer Anteil.

$$-\,\varrho_0 \frac{\partial \psi_p}{\partial \widehat{\boldsymbol{A}}_1} \cdot\cdot\, \dot{\widehat{\boldsymbol{A}}}_1 + \varrho_0 \frac{\partial \psi_p}{\partial \widehat{\boldsymbol{A}}_2} \cdot\cdot\, \dot{\widehat{\boldsymbol{A}}}_2 - \varrho_0\, \frac{1}{\varphi^2}\, \boldsymbol{C}\, \frac{\partial \bar{\psi}_e}{\partial \left(\boldsymbol{C}\boldsymbol{C}^{p\theta-1}\right)} \cdot\cdot\, \dot{\boldsymbol{C}}^{p-1} \;\geq\; 0 \tag{45}$$

Mit der Definition von Variablen

$$\widehat{\boldsymbol{\alpha}} \;=\; \varrho_0 \frac{\partial \psi_p}{\partial \widehat{\boldsymbol{A}}_1}, \qquad \widehat{\boldsymbol{T}}^p \;=\; -\varrho_0 \frac{\partial \psi_p}{\partial \widehat{\boldsymbol{A}}_2} \tag{46}$$

kann diese Beziehung der plastischen Dissipation unter Berücksichtigung von (33) sowie der Rechenregeln für zweifache Überschiebungen transponierter zweistufiger Tensoren weiter vereinfacht werden.

$$\mathcal{D}^p \;=\; -\,\widehat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot\cdot\, \dot{\widehat{\boldsymbol{A}}}_1 - \widehat{\boldsymbol{T}}^p \cdot\cdot\, \dot{\widehat{\boldsymbol{A}}}_2 - \frac{1}{4}\, [\boldsymbol{C}\boldsymbol{T}\boldsymbol{C}^p + \boldsymbol{C}^p\boldsymbol{T}\boldsymbol{C}] \cdot\cdot\, \dot{\boldsymbol{C}}^{p-1} \;\geq\; 0 \tag{47}$$

$$\int_{\Omega_0} \left(\frac{\partial c_{\theta m}(\boldsymbol{E}(\boldsymbol{U}), \theta)}{\partial \boldsymbol{E}} \cdot\cdot\, \boldsymbol{E}\,(\boldsymbol{U}\,; \Delta\boldsymbol{U}) \right) (\theta - \theta_n)\, \vartheta\, d\Omega_0 \tag{142a}$$

$$\int_{\Omega_0} \frac{\partial c_{\theta m}(\boldsymbol{E}(\boldsymbol{U}), \theta)}{\partial \theta}\, \Delta\theta\, (\theta - \theta_n)\, \vartheta\, d\Omega_0 \tag{142b}$$

$$\int_{\Omega_0} \frac{\partial c_{\theta t}(\theta)}{\partial \theta}\, \Delta\theta\, (\theta - \theta_n)\, \vartheta\, d\Omega_0 \tag{142c}$$

im Weiteren nicht berücksichtigt.

In ihrer linearisierten, unter Beachtung des Schemas (131) nach der Zeit diskretisierten Form besteht die gemischte Randwertaufgabe der Thermoelastoplastizität bei großen Verzerrungen in der Lösung des (bezüglich der Feldgrößeninkremente $\Delta\boldsymbol{U}$ und $\Delta\theta$) linearen Gleichungssystems

$$a(\boldsymbol{U}, \theta\,; \Delta\boldsymbol{U}, \boldsymbol{V}) \;+\; b(\boldsymbol{U}, \theta\,; \Delta\theta, \boldsymbol{V}) \;=\; \hat{f}(\boldsymbol{U}, \theta\,; \boldsymbol{V}) \tag{143a}$$

$$d(\boldsymbol{U}, \theta\,; \Delta\boldsymbol{U}, \dot{\theta}_n, \vartheta) \;+\; c(\boldsymbol{U}, \theta\,; \Delta\theta, \dot{\theta}_n, \vartheta) \;=\; \hat{g}(\boldsymbol{U}, \theta\,; \theta, \theta_n, \dot{\theta}_n, \vartheta) \tag{143b}$$

gültig $\forall \boldsymbol{V} \in (H_0^1(\Omega_0))^3$ sowie $\forall \vartheta \in L_2(\Omega_0)$. Dabei gilt unter Verwendung der in (127a)-(127g), (140a)-(140g) sowie (141a)-(141g) angegebenen Beziehungen:

$$a(\boldsymbol{U}, \theta\,; \Delta\boldsymbol{U}, \boldsymbol{V}) \;=\; a_{21}(\boldsymbol{U}, \theta\,; \Delta\boldsymbol{U}, \boldsymbol{V}) \tag{144a}$$

$$b(\boldsymbol{U}, \theta\,; \Delta\theta, \boldsymbol{V}) \;=\; a_{22}(\boldsymbol{U}, \theta\,; \Delta\theta, \boldsymbol{V}) \tag{144b}$$

$$\hat{f}(\boldsymbol{U}, \theta\,; \boldsymbol{V}) \;=\; f(\boldsymbol{V}) \,-\, a_0(\boldsymbol{U}, \theta\,; \boldsymbol{V}) \tag{144c}$$

$$a_{22}(\boldsymbol{U}\,,\theta\,;\Delta\theta,\boldsymbol{V}\,)$$
$$= \int_{\Omega_0} \left(\boldsymbol{E}\,(\boldsymbol{U}\,;\boldsymbol{V}\,) \cdot\cdot \frac{\partial \boldsymbol{T}\,(\boldsymbol{E}(\boldsymbol{U}\,),\theta)}{\partial\theta} \right) \Delta\theta\, d\Omega_0 \tag{141b}$$

$$d_{21}(\boldsymbol{U}\,,\theta\,;\Delta\boldsymbol{U}\,,\dot{\theta}_n,\vartheta)$$
$$= \int_{\Omega_0} \left(\frac{\partial c_{\theta m}(\boldsymbol{E}(\boldsymbol{U}\,),\theta)}{\partial \boldsymbol{E}} \cdot\cdot \boldsymbol{E}\,(\boldsymbol{U}\,;\Delta\boldsymbol{U}\,) \right) \dot{\theta}_n\, \vartheta\, d\Omega_0 \tag{141c}$$

$$d_{22}(\boldsymbol{U}\,,\theta\,;\Delta\theta,\dot{\theta}_n,\vartheta)$$
$$= \int_{\Omega_0} \frac{\partial c_{\theta m}(\boldsymbol{E}(\boldsymbol{U}\,),\theta)}{\partial\theta}\, \Delta\theta\, \dot{\theta}_n\, \vartheta\, d\Omega_0 \tag{141d}$$

$$d_{23}(\boldsymbol{U}\,,\theta\,;\Delta\boldsymbol{U}\,,\vartheta)$$
$$= -\int_{\Omega_0} \left(\frac{\partial w_m(\boldsymbol{E}(\boldsymbol{U}\,),\theta)}{\partial \boldsymbol{E}} \cdot\cdot \boldsymbol{E}\,(\boldsymbol{U}\,;\Delta\boldsymbol{U}\,) \right) \vartheta\, d\Omega_0 \tag{141e}$$

$$d_{24}(\boldsymbol{U}\,,\theta\,;\Delta\theta,\vartheta) = -\int_{\Omega_0} \frac{\partial w_m(\boldsymbol{E}(\boldsymbol{U}\,),\theta)}{\partial\theta}\, \Delta\theta\, \vartheta\, d\Omega_0 \tag{141f}$$

$$c_{21}(\theta\,;\Delta\theta,\dot{\theta}_n,\vartheta) = \int_{\Omega_0} \frac{\partial c_{\theta t}(\theta)}{\partial\theta}\, \Delta\theta\, \dot{\theta}_n\, \vartheta\, d\Omega_0 \tag{141g}$$

Für die weitere konsistente Linearisierung des nichtlinearen Systems (133a), (133b) ist zu berücksichtigen, dass nach der ersten Iteration des Newton-Verfahrens das Inkrement $\Delta\theta$ gleich der Differenz $\theta - \theta_n$ ist. Im Verlauf der folgenden Newton-Iterationen wird $\Delta\theta$ permanent kleiner, um letztlich gegen Null zu streben. Aus diesem Grund werden im Sinne der Linearisierung Produkte von $\Delta\theta$ und $\theta - \theta_n$ bzw. von $\Delta\boldsymbol{U}$ und $\theta - \theta_n$ vernachlässigt. Als Konsequenz werden die in den Ausdrücken (140b) bzw. (140e) enthaltenen Integrale

Dabei stellen $\widehat{\boldsymbol{\alpha}}$ den zu $\widehat{\boldsymbol{A}}_1$ arbeitskonjugierten Rückspannungstensor und $\widehat{\boldsymbol{T}}^p$ einen zu $\widehat{\boldsymbol{A}}_2$ arbeitskonjugierten zweistufigen schiefsymmetrischen Tensor vom Spannungstyp dar.

Unter konsequenter Anwendung von pull-back-Operationen mit dem Abbildungstensor $\boldsymbol{H}$ kann die Beziehung der plastischen Dissipation (47) in materiellen Größen formuliert werden.

$$\mathcal{D}^p = -\,\boldsymbol{\alpha} \cdot\cdot \overset{\triangle}{\boldsymbol{A}}_1 - \boldsymbol{T}^p \cdot\cdot \overset{\triangle}{\boldsymbol{A}}_2 - \frac{1}{4}\,[\boldsymbol{C}\boldsymbol{T}\boldsymbol{C}^p + \boldsymbol{C}^p\boldsymbol{T}\boldsymbol{C}] \cdot\cdot \dot{\boldsymbol{C}}^{p-1} \geq 0 \tag{48}$$

In diesem Zusammenhang gelten folgende Transformationsbeziehungen:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\alpha} &= \boldsymbol{H}^{-1}\widehat{\boldsymbol{\alpha}}\boldsymbol{H}^{-\mathrm{T}}, & \overset{\triangle}{\boldsymbol{A}}_1 &= \dot{\boldsymbol{A}}_1 - \boldsymbol{A}_1\boldsymbol{H}^{-1}\dot{\boldsymbol{H}} - \dot{\boldsymbol{H}}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}^{-T}\boldsymbol{A}_1\,, \\ \boldsymbol{T}^p &= \boldsymbol{H}^{-1}\widehat{\boldsymbol{T}}^p\boldsymbol{H}^{-\mathrm{T}}, & \overset{\triangle}{\boldsymbol{A}}_2 &= \dot{\boldsymbol{A}}_2 - \boldsymbol{A}_2\boldsymbol{H}^{-1}\dot{\boldsymbol{H}} - \dot{\boldsymbol{H}}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}^{-T}\boldsymbol{A}_2\,. \end{aligned} \tag{49}$$

Das Postulat vom Maximum der plastischen Dissipation führt unter der Restriktion der Erfüllung einer geeigneten Fließbedingung

$$F(\boldsymbol{T}\,,\boldsymbol{\alpha}\,,\boldsymbol{T}^p) \leq 0 \tag{50}$$

auf ein Optimierungsproblem mit Nebenbedingung (vgl. [3, 50]), das mittels des Konzepts von Lagrange-Multiplikatoren wie folgt definiert werden kann:

$$\mathcal{M}\,(\boldsymbol{T}\,,\boldsymbol{\alpha}\,,\boldsymbol{T}^p,y) = \mathcal{D}^p\,(\boldsymbol{T}\,,\boldsymbol{\alpha}\,,\boldsymbol{T}^p) - \lambda\, G\,(\boldsymbol{T}\,,\boldsymbol{\alpha}\,,\boldsymbol{T}^p,y) \quad \rightarrow \quad \text{stat}\,. \tag{51}$$

Die Größe λ lässt sich als *plastischer Multiplikator* interpretieren und mit der Schlupfvariable y entsteht aus (50) die Gleichheitsnebenbedingung

$$G(\boldsymbol{T}\,,\boldsymbol{\alpha}\,,\boldsymbol{T}^p) = F(\boldsymbol{T}\,,\boldsymbol{\alpha}\,,\boldsymbol{T}^p) + y^2\,. \tag{52}$$

Bei Auswertung von (51) durch Bildung der Ableitungen von $\mathcal{M}$ nach den unabhängigen Variablen als notwendige Bedingungen für die Existenz des Optimums wird ein Gleichungssystem erhalten, aus dem sich das assoziierte Fließgesetz

$$\boldsymbol{C}^p\dot{\boldsymbol{C}}^{p-1}\boldsymbol{C} + \boldsymbol{C}\dot{\boldsymbol{C}}^{p-1}\boldsymbol{C}^p = -4\,\lambda\,\frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{T}} \tag{53}$$

sowie verallgemeinerte Evolutionsgleichungen für die inneren Variablen zur Beschreibung der Verfestigung ableiten lassen.

$$\overset{\triangle}{\boldsymbol{A}}_1 = -\lambda\frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\alpha}}, \qquad \overset{\triangle}{\boldsymbol{A}}_2 = \lambda\frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{T}^p} \tag{54}$$

An dieser Stelle soll nochmals die Aussage aus dem Abschnitt 2 erwähnt werden, dass der Abbildungstensor $\boldsymbol{H}$ basierend auf dem plastischen Spin (7) ermittelt

werden soll. Als Grundlage wird die folgende konstitutive Beziehung vorgeschlagen:

$$\boldsymbol{W}_D^p \;=\; \overset{\triangle}{\boldsymbol{A}}_2 \,. \tag{55}$$

Zunächst wird bezüglich der inneren Variablen $\widehat{\boldsymbol{A}}_1$ und $\widehat{\boldsymbol{A}}_2$ ein Ansatz für den plastischen Anteil der freien Helmholtz-Energiedichte vorgeschlagen, der lediglich die zweiten Invarianten der unabhängigen Variablen mit temperaturabhängigen Faktoren (Materialfunktionen) berücksichtigt.

$$\psi_p\left(\widehat{\boldsymbol{A}}_1, \widehat{\boldsymbol{A}}_2, \theta\right) \;=\; \frac{1}{2}\,\bar{c}_1(\theta)\,\widehat{\boldsymbol{A}}_1 \cdot\cdot\, \widehat{\boldsymbol{A}}_1 \;-\; \frac{1}{2}\,\bar{c}_2(\theta)\,\widehat{\boldsymbol{A}}_2 \cdot\cdot\, \widehat{\boldsymbol{A}}_2 \tag{56}$$

Damit folgt unter Nutzung der Definitionen (46) auf der Substrukturkonfiguration:

$$\widehat{\boldsymbol{\alpha}} \;=\; c_1(\theta)\,\widehat{\boldsymbol{A}}_1\,, \qquad \widehat{\boldsymbol{T}}^p \;=\; -c_2(\theta)\,\widehat{\boldsymbol{A}}_2 \tag{57}$$

mit

$$c_1(\theta) \;=\; \varrho_0 \bar{c}_1(\theta)\,, \qquad c_2(\theta) \;=\; \varrho_0 \bar{c}_2(\theta)\,. \tag{58}$$

Das nachfolgende pull-back auf die Ausgangskonfiguration unter Verwendung des Abbildungstensors $\boldsymbol{H}$ führt auf die Beziehungen

$$\boldsymbol{\alpha} \;=\; c_1(\theta)\,\boldsymbol{X}\,\boldsymbol{A}_1\,\boldsymbol{X}\,, \qquad \boldsymbol{T}^p \;=\; -c_2(\theta)\,\boldsymbol{X}\,\boldsymbol{A}_2\,\boldsymbol{X} \tag{59}$$

mit

$$\boldsymbol{X} \;=\; \boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{H}^{-\mathrm{T}}\,. \tag{60}$$

Es kann leicht gezeigt werden, dass die Zeitableitung der Beziehungen (59) den folgenden Gleichungen entspricht:

$$\overset{\triangledown}{\boldsymbol{\alpha}} \;=\; c_1(\theta)\,\boldsymbol{X}\,\overset{\triangle}{\boldsymbol{A}}_1\,\boldsymbol{X} \;+\; \frac{\partial c_1}{\partial \theta}\;\dot{\theta}\;\boldsymbol{X}\,\boldsymbol{A}_1\,\boldsymbol{X} \tag{61a}$$

$$\overset{\triangledown}{\boldsymbol{T}}^p \;=\; -\,c_2(\theta)\,\boldsymbol{X}\,\overset{\triangle}{\boldsymbol{A}}_2\,\boldsymbol{X} \;-\; \frac{\partial c_2}{\partial \theta}\;\dot{\theta}\;\boldsymbol{X}\,\boldsymbol{A}_2\,\boldsymbol{X}\,. \tag{61b}$$

Diese Beziehungen werden unter Berücksichtigung der Definitionen (54) und der Funktionen (59) weiter umgeformt.

$$\overset{\triangledown}{\boldsymbol{\alpha}} \;=\; -\,c_1(\theta)\,\lambda\,\boldsymbol{X}\,\frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\alpha}}\boldsymbol{X} \;+\; \frac{1}{c_1}\,\frac{\partial c_1}{\partial \theta}\;\dot{\theta}\;\boldsymbol{\alpha} \tag{62a}$$

$$\overset{\triangledown}{\boldsymbol{T}}^p \;=\; -\,c_2(\theta)\,\lambda\,\boldsymbol{X}\,\frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{T}^p}\boldsymbol{X} \;+\; \frac{1}{c_2}\,\frac{\partial c_2}{\partial \theta}\;\dot{\theta}\;\boldsymbol{T}^p \tag{62b}$$

Die numerische Lösung des Anfangswert-Problems für elastisch-plastische Materialmodelle, die gewöhnlich als Algebro-Differentialgleichungssystem (DAE) vorliegen, erfordert geeignete Zeitintegrationsverfahren. Zu diesem Zweck ist es erforderlich, einen Zusammenhang zwischen den "objektiven" Zeitableitungen von

$$\begin{aligned}
&c_{01}(\theta+\Delta\theta\,;\theta+\Delta\theta,\vartheta) \;-\; c_{01}(\theta+\Delta\theta\,;\theta_n,\vartheta)\\
&= \int_{\Omega_0} c_{\theta t}(\theta+\Delta\theta)\,(\theta+\Delta\theta)\,\vartheta\,d\Omega_0 \;-\; \int_{\Omega_0} c_{\theta t}(\theta+\Delta\theta)\,\theta_n\,\vartheta\,d\Omega_0\\
&= c_{01}(\theta;\theta-\theta_n,\vartheta) \;+\; c_{01}(\theta;\Delta\theta,\vartheta)\\
&\quad + \int_{\Omega_0} \frac{\partial c_{\theta t}(\theta)}{\partial\theta}\,\Delta\theta\,(\theta-\theta_n)\,\vartheta\,d\Omega_0
\end{aligned} \tag{140e}$$

$$\begin{aligned}
&c_{01}(\theta+\Delta\theta\,;\dot{\theta}_n,\vartheta)\\
&= \int_{\Omega_0} c_{\theta t}(\theta+\Delta\theta)\;\dot{\theta}_n\,\vartheta\,d\Omega_0\\
&= c_{01}(\theta;\dot{\theta}_n,\vartheta) \;+\; c_{21}(\theta\,;\Delta\theta,\dot{\theta}_n,\vartheta)
\end{aligned} \tag{140f}$$

$$\begin{aligned}
&c_{02}(\theta+\Delta\theta\,,\vartheta)\\
&= \int_{\Omega_0} (\mathrm{Grad}\vartheta)\;\boldsymbol{K}_\theta\,(\mathrm{Grad}\,(\theta+\Delta\theta))\;d\Omega_0\\
&= c_{02}(\theta\,,\vartheta) + c_{02}(\Delta\theta,\vartheta)
\end{aligned} \tag{140g}$$

In diesem Zusammenhang stellen $\Delta\boldsymbol{U}$ und $\Delta\theta$ die in der aktuellen Newton-Iteration des betrachteten Lastschritts zu berechnenden Feldgrößeninkremente dar, während $\boldsymbol{U}$ sowie θ aus der Lösung der vorangegangenen Newton-Iteration und θ_n nebst $\dot{\theta}_n$ aus der Lösung des vorherigen Lastschritts als bekannt vorausgesetzt werden.

Bezüglich der in (140a)-(140g) neu definierten Funktionale gilt:

$$\begin{aligned}
&a_{21}(\boldsymbol{U}\,,\theta\,;\Delta\boldsymbol{U}\,,\boldsymbol{V}\,)\\
&= \int_{\Omega_0} \boldsymbol{E}\,(\boldsymbol{U}\,;\boldsymbol{V}\,) \cdot\cdot\, \frac{\partial \boldsymbol{T}\,(\boldsymbol{E}\,(\boldsymbol{U}\,),\theta)}{\partial \boldsymbol{E}} \cdot\cdot\, \boldsymbol{E}\,(\boldsymbol{U}\,;\Delta\boldsymbol{U}\,)\;d\Omega_0\\
&\quad + \int_{\Omega_0} \boldsymbol{T}\,(\boldsymbol{E}\,(\boldsymbol{U}\,),\theta) \cdot\cdot\, \mathrm{Grad}\Delta\boldsymbol{U}\,(\mathrm{Grad}\boldsymbol{V}\,)^{\mathrm{T}}\,d\Omega_0
\end{aligned} \tag{141a}$$

die Teilfunktionale des Systems:

$$
\begin{aligned}
& a_0(\boldsymbol{U}+\Delta\boldsymbol{U},\theta+\Delta\theta\,;\boldsymbol{V}) \\
&= \int_{\Omega_0} \boldsymbol{T}(\boldsymbol{E}(\boldsymbol{U}+\Delta\boldsymbol{U}),\theta+\Delta\theta) \cdot\cdot\, \boldsymbol{E}(\boldsymbol{U}+\Delta\boldsymbol{U};\boldsymbol{V})\, d\Omega_0 \\
&= a_0(\boldsymbol{U},\theta\,;\boldsymbol{V}) + a_{21}(\boldsymbol{U},\theta\,;\Delta\boldsymbol{U},\boldsymbol{V}) + a_{22}(\boldsymbol{U},\theta\,;\Delta\theta,\boldsymbol{V}) \qquad (140a)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
& d_{01}(\boldsymbol{U}+\Delta\boldsymbol{U},\theta+\Delta\theta\,;\theta+\Delta\theta,\vartheta) - d_{01}(\boldsymbol{U}+\Delta\boldsymbol{U},\theta+\Delta\theta\,;\theta_n,\vartheta) \\
&= \int_{\Omega_0} c_{\theta m}(\boldsymbol{E}(\boldsymbol{U}+\Delta\boldsymbol{U}),\theta+\Delta\theta)\,(\theta+\Delta\theta)\,\vartheta\, d\Omega_0 \\
&\quad - \int_{\Omega_0} c_{\theta m}(\boldsymbol{E}(\boldsymbol{U}+\Delta\boldsymbol{U}),\theta+\Delta\theta)\,\theta_n\,\vartheta\, d\Omega_0 \\
&= d_{01}(\boldsymbol{U},\theta;\theta-\theta_n,\vartheta) + d_{01}(\boldsymbol{U},\theta;\Delta\theta,\vartheta) \\
&\quad + \int_{\Omega_0} \left(\frac{\partial c_{\theta m}(\boldsymbol{E}(\boldsymbol{U}),\theta)}{\partial \boldsymbol{E}} \cdot\cdot\, \boldsymbol{E}\,(\boldsymbol{U};\Delta\boldsymbol{U}) \right) (\theta-\theta_n)\,\vartheta\, d\Omega_0 \\
&\quad + \int_{\Omega_0} \frac{\partial c_{\theta m}(\boldsymbol{E}(\boldsymbol{U}),\theta)}{\partial\theta}\,\Delta\theta\,(\theta-\theta_n)\,\vartheta\, d\Omega_0 \qquad (140b)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
& d_{01}(\boldsymbol{U}+\Delta\boldsymbol{U},\theta+\Delta\theta\,;\dot{\theta}_n,\vartheta) \\
&= \int_{\Omega_0} c_{\theta m}(\boldsymbol{E}(\boldsymbol{U}+\Delta\boldsymbol{U}),\theta+\Delta\theta)\,\dot{\theta}_n\,\vartheta\, d\Omega_0 \\
&= d_{01}(\boldsymbol{U},\theta;\dot{\theta}_n,\vartheta) \\
&\quad + d_{21}(\boldsymbol{U},\theta\,;\Delta\boldsymbol{U},\dot{\theta}_n,\vartheta) + d_{22}(\boldsymbol{U},\theta\,;\Delta\theta,\dot{\theta}_n,\vartheta) \qquad (140c)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
& d_{02}(\boldsymbol{U}+\Delta\boldsymbol{U},\theta+\Delta\theta\,;\vartheta) \\
&= -\int_{\Omega_0} w_m(\boldsymbol{E}(\boldsymbol{U}+\Delta\boldsymbol{U}),\theta+\Delta\theta)\,\vartheta\, d\Omega_0 \\
&= d_{02}(\boldsymbol{U},\theta;\vartheta) + d_{23}(\boldsymbol{U},\theta\,;\Delta\boldsymbol{U},\vartheta) + d_{24}(\boldsymbol{U},\theta\,;\Delta\theta,\vartheta) \qquad (140d)
\end{aligned}
$$

$\boldsymbol{\alpha}$ und $\boldsymbol{T}^p$ ($\triangledown$-Ableitung) sowie deren materiellen Zeitableitungen auf der Ausgangskonfiguration herzustellen. Sie können unter Verwendung einfacher mathematischer Operationen aus (49) abgeleitet werden.

$$
\begin{aligned}
\dot{\boldsymbol{\alpha}} &= \overset{\triangledown}{\boldsymbol{\alpha}} - \boldsymbol{H}^{-1}\dot{\boldsymbol{H}}\,\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\alpha}\,\dot{\boldsymbol{H}}^{T}\boldsymbol{H}^{-T} \qquad (63a) \\
\dot{\boldsymbol{T}}^{p} &= \overset{\triangledown}{\boldsymbol{T}}^{p} - \boldsymbol{H}^{-1}\dot{\boldsymbol{H}}\,\boldsymbol{T}^{p} - \boldsymbol{T}^{p}\dot{\boldsymbol{H}}^{T}\boldsymbol{H}^{-T} \qquad (63b)
\end{aligned}
$$

Wegen der Abhängigkeit der Fließbedingung von einer Vergleichsspannung T_F, die ihrerseits im Sinne einer Regel zur Beschreibung der isotropen Verfestigung eine Funktion der plastischen Bogenlänge E_v^p darstellt, wird zusätzlich eine Evolutionsgleichung für E_v^p benötigt. Entsprechend der in [3] verwendeten Definition wird die Geschwindigkeit der Änderung der plastischen Bogenlänge mit

$$
\dot{E}_v^p = \lambda \sqrt{\frac{2}{3}\,\boldsymbol{C}^{-1}\frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{T}} \cdot\cdot\, \boldsymbol{C}^{-1}\frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{T}}} \qquad (64)
$$

angegeben.

Zusammenfassend kann das plastische Teildeformationsgesetz des betrachteten thermoelastoplastischen Modells im Rahmen eines Substrukturansatzes unter Berücksichtigung der Beziehung (53), (63b) mit (62b) sowie (64) als DAE formuliert werden.

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{C}^p\dot{\boldsymbol{C}}^{p-1}\boldsymbol{C} + \boldsymbol{C}\dot{\boldsymbol{C}}^{p-1}\boldsymbol{C}^p + 4\,\lambda\frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{T}} &= \boldsymbol{0} \qquad (65a) \\
\dot{\boldsymbol{\alpha}} + c_1(\theta)\,\lambda\,\boldsymbol{X}\frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\alpha}}\boldsymbol{X} + \boldsymbol{H}^{-1}\dot{\boldsymbol{H}}\,\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\alpha}\,\dot{\boldsymbol{H}}^{T}\boldsymbol{H}^{-T} - \frac{1}{c_1}\frac{\partial c_1}{\partial\theta}\,\dot{\theta}\,\boldsymbol{\alpha} &= \boldsymbol{0} \qquad (65b) \\
\dot{\boldsymbol{T}}^p + c_2(\theta)\,\lambda\,\boldsymbol{X}\frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{T}^p}\boldsymbol{X} + \boldsymbol{H}^{-1}\dot{\boldsymbol{H}}\,\boldsymbol{T}^p + \boldsymbol{T}^p\dot{\boldsymbol{H}}^{T}\boldsymbol{H}^{-T} - \frac{1}{c_2}\frac{\partial c_2}{\partial\theta}\,\dot{\theta}\,\boldsymbol{T}^p &= \boldsymbol{0} \qquad (65c) \\
\dot{E}_v^p - \lambda\sqrt{\frac{2}{3}\,\boldsymbol{C}^{-1}\frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{T}} \cdot\cdot\, \boldsymbol{C}^{-1}\frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{T}}} &= 0 \qquad (65d)
\end{aligned}
$$

Unter Verwendung einer Lösungsstrategie, die im Detail in [3, 7, 17] erläutert ist, wird das System (65a)-(65d) unter Verwendung eines verallgemeinerten impliziten Schemas nach der Zeit diskretisiert und damit in ein nichtlineares algebraisches Gleichungssystem überführt.

Im Rahmen des vorgestellten Ansatzes können die Komponenten des Spannungstensors explizit mit Hilfe der Gleichung (33) ermittelt werden. Es soll hier lediglich erwähnt werden, dass anstelle von Gleichung (53) auch eine Evolutionsgleichung bezüglich der Spannung bzw. des plastischen Teildeformationsgradienten eingesetzt werden kann (vgl. [3, 18]).

3.5 Auswahl spezieller temperaturabhängiger konstitutiver Funktionen

Die Temperaturabhängigkeit elastischer und plastischer Teilprozesse sowie der Wärmedehnungen und der Wärmekapazität realer Materialien erfordert die Definition spezieller konstitutiver Ansätze für Materialparameter, freie Helmholtz-Energiedichte sowie weitere Materialfunktionen. In diesem Abschnitt sollen einige zweckmäßige Modelle vorgestellt werden, die zu einem großen Teil der Literatur entnommen wurden. Bei praktischen Anwendungen sind die entsprechenden Funktionen auf der Basis experimenteller Daten zu definieren und zu kalibrieren.

Zur Herleitung eines zweckmäßigen Ansatzes für die Funktion $\varphi(\theta)$, von welcher der thermische Teildeformationsgradient (19) abhängt, sollen rein thermisch induzierte, isotrope Verzerrungsprozesse betrachtet werden. Dann gilt für die zeitliche Änderung eines Volumenelementes $d\Omega$ die Beziehung

$$(d\Omega)^{\cdot} \;=\; \frac{\partial (d\Omega)}{\partial \theta}\;\dot{\theta}\;. \tag{66}$$

Wird in dem Zusammenhang die Wärmedehnung als lineare Funktion der Temperatur mit dem linearen Wärmeausdehnungskoeffizienten $\alpha(\theta)$ als Proportionalitätsfaktor angesehen, so kann dieser Ausdruck vereinfacht werden.

$$(d\Omega)^{\cdot} \;=\; 3\,\alpha(\theta)\,d\Omega\;\dot{\theta} \tag{67}$$

Andererseits gilt für den betrachteten Fall reiner Wärmedehnungen wegen $d\Omega = \det \boldsymbol{F}^{\theta}\, d\Omega_0$ (mit dem unverformten, materiellen Volumenelement $d\Omega_0$) für die zeitliche Änderung des Volumenelementes

$$\begin{aligned}
(d\Omega)^{\cdot} &= (\det \boldsymbol{F}^{\theta})^{\cdot}\, d\Omega_0 \\
&= \frac{\partial(\det \boldsymbol{F}^{\theta})}{\partial \boldsymbol{F}^{\theta}} \cdot\cdot\, \dot{\boldsymbol{F}}^{\theta \mathrm{T}}\, d\Omega_0 \\
&= \det \boldsymbol{F}^{\theta}\, \left(\boldsymbol{F}^{\theta-\mathrm{T}} \cdot\cdot\, \dot{\boldsymbol{F}}^{\theta \mathrm{T}}\right)\, d\Omega_0 \\
&= \left(\boldsymbol{F}^{\theta-1} \cdot\cdot\, \dot{\boldsymbol{F}}^{\theta}\right)\, \frac{d\Omega}{d\Omega_0}\, d\Omega_0 \\
&= \left(\dot{\boldsymbol{F}}^{\theta} \boldsymbol{F}^{\theta-1} \cdot\cdot\, \boldsymbol{I}\right)\, d\Omega \\
&= \frac{\partial \varphi}{\partial \theta}\;\dot{\theta}\;\frac{1}{\varphi}\;(\boldsymbol{I} \cdot\cdot\, \boldsymbol{I})\; d\Omega \\
&= \frac{3}{\varphi}\,\frac{\partial \varphi}{\partial \theta}\;\dot{\theta}\; d\Omega\,.
\end{aligned} \tag{68}$$

Weiterhin folgt für $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{U}+\Delta\boldsymbol{U};\boldsymbol{V})$ die Beziehung:

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{E}\,(\boldsymbol{U}+\Delta\boldsymbol{U};\boldsymbol{V}) &= \boldsymbol{E}\,(\boldsymbol{U};\boldsymbol{V}) \\
&\quad + \frac{1}{2}\big[\mathrm{Grad}\Delta\boldsymbol{U}\,(\mathrm{Grad}\boldsymbol{V})^{\mathrm{T}} + \mathrm{Grad}\boldsymbol{V}\,(\mathrm{Grad}\Delta\boldsymbol{U})^{\mathrm{T}}\big]\;.
\end{aligned} \tag{138}$$

In analoger Weise können Linearisierungen für die Anteile der spezifischen Wärmekapazität c_θ (101) sowie der thermomechanischen Koppelgröße w_m mit den Beiträgen (102)-(104) angegeben werden.

$$\begin{aligned}
&c_{\theta m}(\boldsymbol{E}(\boldsymbol{U}+\Delta\boldsymbol{U}),\theta+\Delta\theta) \\
&\quad = c_{\theta m}(\boldsymbol{E}(\boldsymbol{U}),\theta) \\
&\qquad + \frac{\partial c_{\theta m}(\boldsymbol{E}(\boldsymbol{U}),\theta)}{\partial \boldsymbol{E}} \cdot\cdot\, \Delta\boldsymbol{E} \;+\; \frac{\partial c_{\theta m}(\boldsymbol{E}(\boldsymbol{U}),\theta)}{\partial \theta}\Delta\theta
\end{aligned} \tag{139a}$$

$$\begin{aligned}
&w_m(\boldsymbol{E}(\boldsymbol{U}+\Delta\boldsymbol{U}),\theta+\Delta\theta) \\
&\quad = w_m(\boldsymbol{E}(\boldsymbol{U}),\theta) + \frac{\partial w_m(\boldsymbol{E}(\boldsymbol{U}),\theta)}{\partial \boldsymbol{E}} \cdot\cdot \Delta\boldsymbol{E} + \frac{\partial w_m(\boldsymbol{E}(\boldsymbol{U}),\theta)}{\partial \theta}\Delta\theta
\end{aligned} \tag{139b}$$

$$c_{\theta t}(\theta+\Delta\theta) \;=\; c_{\theta t}(\theta) \;+\; \frac{\partial c_{\theta t}(\theta)}{\partial \theta}\Delta\theta \tag{139c}$$

$$\mathrm{Grad}(\theta+\Delta\theta) \;=\; \mathrm{Grad}\,\theta \;+\; \mathrm{Grad}\,\Delta\theta \tag{139d}$$

Aus Gründen der numerischen Vereinfachung wird auf die Linearisierung der Wärmeleitmatrix $\boldsymbol{K}_\theta$ verzichtet, obwohl das pull-back auf die Ausgangskonfiguration (124) eine Abhängigkeit von den Verschiebungsvariablen $\boldsymbol{U}$ anzeigt. Es kann davon ausgegangen werden, dass in diesem Zusammenhang das Konvergenzverhalten der inkrementell-iterativen Lösung des Randwertproblems nicht merklich beeinträchtigt wird. Es ist zweckmäßig, die Wärmeleitmatrix während eines Lastschritts konstant zu halten und an dessen Ende in einer Art Postprozessing an den aktuellen Deformationszustand anzupassen. Alternativ kann die Wärmeleitmatrix auch während der Gleichgewichtsiterationen mit den jeweiligen Verzerrungen neu berechnet werden.

Werden die oben angegebenen Linearisierungen von Verzerrungs-, Spannungs-, thermischen und gekoppelten Variablen in das Gleichungssystem (133a), (133b) mit den Ausdrücken (127a)-(127g) sowie (134a)-(134b) eingesetzt, folgt bei Vernachlässigung von Termen, die mindestens quadratisch in separaten oder gemischten Termen der Inkremente der Prozessvariablen $\Delta\boldsymbol{U}$ sowie $\Delta\theta$ sind, für

mit

$$d_1(\boldsymbol{U},\theta\,;\theta,\theta_n,\dot{\theta}_n,\vartheta) \;=\; d_{01}(\boldsymbol{U},\theta\,;\theta,\vartheta) \;-\; d_{01}(\boldsymbol{U},\theta\,;\theta_n,\vartheta) - (1-\alpha)\Delta t\, d_{01}(\boldsymbol{U},\theta;\dot{\theta}_n,\vartheta) + \alpha\Delta t\, d_{02}(\boldsymbol{U},\theta;\vartheta), \quad (134a)$$

$$c_1(\theta\,;\theta,\theta_n,\dot{\theta}_n,\vartheta) \;=\; c_{01}(\theta\,;\theta,\vartheta) \;-\; c_{01}(\theta\,;\theta_n,\vartheta) - (1-\alpha)\,\Delta t\; c_{01}(\theta\,;\dot{\theta}_n,\vartheta) \;+\; \alpha\,\Delta t\; c_{02}(\theta\,,\vartheta)\,. \quad (134b)$$

Für die Linearisierung des nichtlinearen Systems (133a), (133b) im Sinne des Newton-Verfahrens werden im Folgenden Taylor-Entwicklungen bezüglich beider Feldvariablen $\boldsymbol{U}$ und θ betrachtet.

Gegeben sei die Lösung des Zweifeldproblems $(\boldsymbol{U}\,,\theta) \stackrel{\text{def}}{=} (\boldsymbol{U}^i_{t+\Delta t},\theta^i_{t+\Delta t})$ aus der i-ten Newton-Iteration zur Zeit $t_{n+1} = t + \Delta t$ mit $(\boldsymbol{U}^0_{t+\Delta t},\theta^0_{t+\Delta t}) = (\boldsymbol{U}_n,\theta_n)$, gesucht ist die Lösung $(\boldsymbol{U}+\Delta\boldsymbol{U}\,,\theta+\Delta\theta) \stackrel{\text{def}}{=} (\boldsymbol{U}^{i+1}_{t+\Delta t},\theta^{i+1}_{t+\Delta t})$ in der (aktuellen) $(i+1)$-ten Newton-Iteration zum Zeitpunkt t_{n+1}. Der Spannungstensor $\boldsymbol{T}$ kann als nichtlineare Funktion des Verzerrungstensors $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{U})$ und der Temperatur θ angesehen werden. Seine Linearisierung erfolgt über eine Taylor-Entwicklung, die nach dem ersten Glied abgebrochen wird.

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{T}(\boldsymbol{E}(\boldsymbol{U}+\Delta\boldsymbol{U}),\theta+\Delta\theta)\\ &= \boldsymbol{T}(\boldsymbol{E}(\boldsymbol{U}),\theta) + \frac{\partial\boldsymbol{T}(\boldsymbol{E}(\boldsymbol{U}),\theta)}{\partial\boldsymbol{E}} \cdot\cdot\, \Delta\boldsymbol{E} + \frac{\partial\boldsymbol{T}(\boldsymbol{E}(\boldsymbol{U}),\theta)}{\partial\theta}\Delta\theta \quad (135)\end{aligned}$$

Dabei gilt:

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{U}) = \frac{1}{2}\big[(\mathrm{Grad}\boldsymbol{U})^{\mathrm{T}} + \mathrm{Grad}\boldsymbol{U} + \mathrm{Grad}\boldsymbol{U}\,(\mathrm{Grad}\boldsymbol{U})^{\mathrm{T}}\big] \quad (136a)$$

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{U}+\Delta\boldsymbol{U}) = \frac{1}{2}\big[(\mathrm{Grad}(\boldsymbol{U}+\Delta\boldsymbol{U}))^{\mathrm{T}} + \mathrm{Grad}(\boldsymbol{U}+\Delta\boldsymbol{U}) + \mathrm{Grad}(\boldsymbol{U}+\Delta\boldsymbol{U})(\mathrm{Grad}(\boldsymbol{U}+\Delta\boldsymbol{U}))^{\mathrm{T}}\big] \quad (136b)$$

und

$$\begin{aligned}\Delta\boldsymbol{E} &= \boldsymbol{E}(\boldsymbol{U}+\Delta\boldsymbol{U}) - \boldsymbol{E}(\boldsymbol{U})\\ &= \frac{1}{2}\big[(\mathrm{Grad}\Delta\boldsymbol{U})^{\mathrm{T}} + \mathrm{Grad}\Delta\boldsymbol{U} + \mathrm{Grad}\boldsymbol{U}\,(\mathrm{Grad}\Delta\boldsymbol{U})^{\mathrm{T}}\\ &\quad + \mathrm{Grad}\Delta\boldsymbol{U}\,(\mathrm{Grad}\boldsymbol{U})^{\mathrm{T}} + \mathrm{Grad}\Delta\boldsymbol{U}\,(\mathrm{Grad}\Delta\boldsymbol{U})^{\mathrm{T}}\big]\\ &= \boldsymbol{E}(\boldsymbol{U}\,;\Delta\boldsymbol{U}) + \frac{1}{2}\mathrm{Grad}\Delta\boldsymbol{U}\,(\mathrm{Grad}\Delta\boldsymbol{U})^{\mathrm{T}}\,. \quad (137)\end{aligned}$$

Aus dem Vergleich von (67) mit (68) ergibt sich für den linearen Wärmeausdehnungskoeffizienten

$$\alpha(\theta) \;=\; \frac{1}{\varphi}\,\frac{d\varphi}{d\theta}\,. \quad (69)$$

Hier ist die partielle Ableitung nach der Temperatur durch die vollständige Ableitung ersetzt worden, da die beteiligten Funktionen lediglich von der Temperatur abhängen sollen. Nach Multiplikation mit dem Temperaturdifferential und Integration der entstandenen Beziehung folgt unter Berücksichtigung der Bedingung $\varphi(\theta=\theta_0) = 1$[5]:

$$\ln\varphi(\theta) \;=\; \int_{\theta_0}^{\theta} \alpha(\theta)\,d\theta \qquad \Rightarrow \qquad \varphi(\theta) \;=\; e^{\int_{\theta_0}^{\theta}\alpha(\theta)\,d\theta}\,. \quad (70)$$

Unter der vereinfachenden Annahme, dass der Wärmeausdehnungskoeffizient nicht temperaturabhängig sein soll, folgt für die Funktion der (isotropen) Wärmeausdehnung:

$$\varphi(\theta) \;=\; e^{\,\alpha(\theta-\theta_0)}\,. \quad (71)$$

Eine weitere Vereinfachung von (71) ergibt sich nach der Linearisierung der Exponentialfunktion durch Zerlegung in eine Taylorreihe und Abbruch nach dem linearen Glied.

$$\varphi(\theta) \;=\; 1 \;+\; \alpha(\theta-\theta_0) \quad (72)$$

In der Literatur werden die Ansätze (71), (72) unter anderem in [15, 24, 37, 38] verwendet, ohne dass ihre Herleitung immer ausführlich diskutiert wird. Bei Temperaturabhängigkeit von α, die beispielsweise in der Umformtechnik eine wesentliche Rolle spielt, ist ein geeigneter funktionaler Zusammenhang für $\alpha = \alpha(\theta)$ zu definieren und die obige Herleitung entsprechend zu wiederholen.

Bezüglich der Temperaturabhängigkeit der Materialparameter des elastischen Teildeformationsgesetzes gibt Wegener [57] im Fall kleiner Verzerrungen eine lineare Beziehung für den Elastizitätsmodul E an, während er die Querkontraktionszahl ν als konstant annimmt.

$$E \;=\; E_0 \;+\; \beta_E\,(\theta-\theta_0) \qquad \text{mit} \qquad E_0 \;=\; E(\theta_0) \quad (73)$$

Falls sich diese Annahme aus experimenteller Sicht als zweckmäßig erweist, können damit einzelne Materialparameter hyperelastischer Ansätze im Bereich kleiner Verzerrungen abgeschätzt werden. So werden beispielsweise bei Bucher [3] Zusammenhänge bezüglich der Parameter eines kompressiblen Neo-Hooke-Modells diskutiert.

$$c_{10} \;=\; \frac{E}{4(1+\nu)}\,, \qquad D_2 \;=\; \frac{c_{10}}{2}\,\frac{\nu}{1-2\nu} \quad (74)$$

[5] Wenn nicht anders vermerkt, soll hier und im Weiteren als Bezugstemperatur θ_0 jeweils die Raumtemperatur von 293,15 K verwendet werden.

Heimes [24] schlägt für die Temperaturabhängigkeit von Materialparametern hyperelastischer Teilmodelle die Funktionen

$$\kappa \;=\; \kappa_0 \, \frac{\theta}{\theta_0} \tag{75}$$

bzw.

$$\kappa \;=\; \kappa_0 \, (1 \,+\, \beta_\kappa (\theta - \theta_0)) \tag{76}$$

vor. Dabei steht κ für einen beliebigen Materialparameter mit $\kappa_0 = \kappa(\theta_0)$. Für $\kappa = E$ stimmen (76) und (73) überein.

Konkrete Angaben für die Temperaturabhängigkeit der Materialparameter des plastischen Teildeformationsgesetzes sind zum Beispiel in [47] zu finden. Von Wegener [57] stammt eine ebenfalls lineare Beziehung für die Anfangsfließspannung T_{F0}.

$$T_{F0} \;=\; T_{F0}(\theta_0) \,+\, \beta_{T_F} \, (\theta - \theta_0) \tag{77}$$

Geeignete funktionale Zusammenhänge zwischen Materialparametern und der Temperatur zu finden, stellt insbesondere experimentell eine Herausforderung dar, die den konkreten Materialspezifika Rechnung zu tragen hat. Bezüglich der Modelle sollte stets der Grundsatz gelten: *So einfach wie möglich, so genau wie nötig.*

Vergleichsweise breiten Raum nimmt in der Literatur die Herleitung und Diskussion einer geeigneten Beziehung zwischen der die Wärmespeicherung bestimmenden Wärmekapazität $c_{\theta t}$ und der Temperatur sowie der damit zusammen hängenden Definition des explizit von der Temperatur abhängigen Anteils der freien Helmholtz-Energiedichte ein. Wie in Abschnitt 5 ausführlich gezeigt wird, gilt

$$c_{\theta t} \;=\; -\theta \, \frac{\partial^2 (\varrho_0 \psi)}{\partial \theta^2} \, . \tag{78}$$

In diesem Zusammenhang zeigen Ottosen und Ristinmaa [47], dass bei konstanten oder nur linear von der Temperatur abhängigen Materialparametern des elastischen und des plastischen Anteils der freien Helmholtz-Energiedichte die Wärmekapazität $c_{\theta t}$ allein durch den thermischen Anteil ψ_θ von ψ bestimmt wird. Für Aluminium weisen die Autoren zudem nach, dass selbst bei komplexeren Temperaturabhängigkeiten von Materialparametern, der Beitrag des thermischen Anteils der freien Helmholtz-Energiedichte dominiert. Somit kann allgemein geschrieben werden:

$$c_{\theta t} \;=\; -\theta \, \frac{\partial^2 (\varrho_0 \psi_\theta)}{\partial \theta^2} \, . \tag{79}$$

für die Lösung des gemischten Randwertproblems kommt eine lineare Abhängigkeit von der zeitlichen Ableitung der Temperatur in $d_0(\boldsymbol{U}\,, \theta\,; \dot{\theta}, \vartheta)$ sowie $c_0(\theta\,; \dot{\theta}, \vartheta)$ hinzu. Vor der Linearisierung des Gleichungssystems ist somit zunächst eine geeignete zeitliche Auflösung von Zeitdifferentialen durch Differenzenansätze durchzuführen.

Die Zeitdiskretisierung erfolgt unter Nutzung des verallgemeinerten Einschritt-Differenzen-Verfahrens (Integrationsalgorithmus)

$$y_{n+1} \;=\; y_n \,+\, (\alpha \, f_{n+1} \,+\, (1 - \alpha) \, f_n) \, \Delta t \tag{128}$$

mit

$$\Delta t \;=\; t_{n+1} \,-\, t_n \tag{129}$$

und

$$\alpha \,\in\, [0, 1], \qquad \alpha \;=\; \begin{cases} 0,0 & : \text{ Euler vorwärts} \\ 1,0 & : \text{ Euler rückwärts} \\ 0,5 & : \text{ Crank-Nicolson (Trapezregel)} \end{cases}$$

für eine gewöhnliche Differentialgleichung

$$\frac{d\, y}{d\, t} \;=\; \dot{y} \;=\; f(t,\, y) \, . \tag{130}$$

Bezüglich der materiellen Zeitableitung der Temperatur lässt sich somit eine zu (128) analoge Beziehung angeben.

$$\theta_{n+1} \;=\; \theta_n \,+\, \left[\alpha \, \dot{\theta}_{n+1} + (1 - \alpha) \, \dot{\theta}_n \right] \Delta t \tag{131}$$

Hier weist der Index $(.)_n$ auf Variablen zum Zeitpunkt t_n hin, die aus der Lösung des vorangegangenen Lastschritts bekannt sind, der Index $(.)_{n+1}$ auf Variablen, die Bestandteil der aktuellen Lösung zur Zeit t_{n+1} sind. Auf Letzteren soll im Weiteren verzichtet werden. Nach Umstellung von (131) ergibt sich somit:

$$\dot{\theta} \;=\; \frac{1}{\alpha \, \Delta t} \, \theta \,-\, \frac{1}{\alpha \, \Delta t} \, \theta_n \,-\, \frac{1 - \alpha}{\alpha} \, \dot{\theta}_n \, . \tag{132}$$

Die Anwendung dieser Zeitdiskretisierung auf die Beziehungen (126a), (126b) führt auf ein nichtlineares Gleichungssystem, in dem nur noch die aktuellen (unbekannten) Werte der Primärvariablen selbst, jedoch nicht mehr deren Ableitungen zur Zeit t_{n+1} enthalten sind.

$$a_0(\boldsymbol{U}\,, \theta\,; \boldsymbol{V}\,) \qquad\qquad = \quad f(\boldsymbol{V}\,) \tag{133a}$$

$$d_1(\boldsymbol{U}\,, \theta\,; \theta, \theta_n, \dot{\theta}_n, \vartheta) \,+\, c_1(\theta\,; \theta, \theta_n, \dot{\theta}_n, \vartheta) \quad = \quad \alpha \, \Delta t \; g(\vartheta) \tag{133b}$$

$$a_0(\boldsymbol{U}\,,\theta\,;\boldsymbol{V}\,) \;=\; \int\limits_{\Omega_0} \boldsymbol{T} \cdot\cdot\, \boldsymbol{E}\,(\boldsymbol{U}\,;\boldsymbol{V}\,)\; d\Omega_0 \tag{127a}$$

$$d_0(\boldsymbol{U}\,,\theta\,;\dot{\theta},\vartheta) \;=\; d_{01}(\boldsymbol{U}\,,\theta\,;\dot{\theta},\vartheta) \,+\, d_{02}(\boldsymbol{U}\,,\theta\,;\vartheta)$$

$$d_{01}(\boldsymbol{U}\,,\theta\,;\dot{\theta},\vartheta) \;=\; \int\limits_{\Omega_0} c_{\theta m}\; \dot{\theta}\; \vartheta\; d\Omega_0 \tag{127b}$$

$$d_{02}(\boldsymbol{U}\,,\theta\,;\vartheta) \;=\; -\int\limits_{\Omega_0} w_m\, \vartheta\; d\Omega_0 \tag{127c}$$

$$f(\boldsymbol{V}\,) \;=\; \int\limits_{\Gamma_{0NU}} \bar{\boldsymbol{R}}_U \boldsymbol{V}\; d\Gamma_0 \tag{127d}$$

$$c_0(\theta\,;\dot{\theta},\vartheta) \;=\; c_{01}(\theta\,;\dot{\theta},\vartheta) \,+\, c_{02}(\theta\,,\vartheta)$$

$$c_{01}(\theta\,;\dot{\theta},\vartheta) \;=\; \int\limits_{\Omega_0} c_{\theta t}\; \dot{\theta}\; \vartheta\; d\Omega_0 \tag{127e}$$

$$c_{02}(\theta\,,\vartheta) \;=\; \int\limits_{\Omega_0} (\mathrm{Grad}\vartheta)\; \boldsymbol{K}_\theta\, (\mathrm{Grad}\,\theta)\; d\Omega_0 \tag{127f}$$

$$g(\vartheta) \;=\; -\int\limits_{\Gamma_{0N\theta}} \bar{R}_\theta\, \vartheta\; d\Gamma_0\,. \tag{127g}$$

Zur Vereinfachung der weiteren Betrachtungen wird einschränkend davon ausgegangen, dass eingeprägte Kräfte und Randflüsse nicht von den numerischen Prozessvariablen abhängen.

5.2 Linearisierung der schwachen Formulierungen

Zur Lösung des Gleichungssystems (126a) und (126b) mit Hilfe des Newton-Verfahrens macht sich dessen Linearisierung erforderlich. Dazu ist zu bemerken, dass die Abhängigkeit von den Verschiebungen $\boldsymbol{U}$ und der Temperatur θ in den Teilfunktionalen $a_0(\boldsymbol{U}\,,\theta\,;\boldsymbol{V}\,)$ und $d_0(\boldsymbol{U}\,,\theta\,;\dot{\theta},\vartheta)$ sowie die von der Temperatur zusätzlich in $c_0(\theta\,;\dot{\theta},\vartheta)$ nichtlinearen Charakter trägt. Hinsichtlich $\boldsymbol{V}$ und ϑ bestehen im System (126a), (126b) lediglich lineare Abhängigkeiten. Erschwerend

Drei konkrete Ansätze für die Funktion $c_{\theta t} = c_{\theta t}(\theta)$ kristallisieren sich im relevanten Schrifttum besonders heraus.

$$c_{\theta t} \;=\; c_{\theta t0} \;=\; \text{konst} \qquad \text{(Fritsch [15])} \tag{80a}$$

$$c_{\theta t} \;=\; \kappa_{c_{\theta t}}\, c_{\theta t0}\, \theta \qquad \text{(Heimes [24] u.a.)} \tag{80b}$$

$$c_{\theta t} \;=\; c_{\theta t0}\,[1 + \kappa_{c_{\theta t}}(\theta - \theta_0)] \qquad \text{([24, 56])} \tag{80c}$$

Dabei gilt jeweils $c_{\theta t0} = c_{\theta t}(\theta = \theta_0)$. Für $\kappa_{c_{\theta t}}$ setzt Heimes [24] beispielsweise $\kappa_{c_{\theta t}} = 1/\theta_0$ an. Nach jeweils zweimaliger Integration über die Temperatur folgen unter Berücksichtigung der Anfangsbedingungen

$$\psi_\theta(\theta = \theta_0) \;=\; 0\,, \qquad \left.\frac{\partial \psi_\theta}{\partial \theta}\right|_{\theta=\theta_0} = 0 \tag{81}$$

die entsprechenden Ansätze für den explizit temperaturabhängigen Anteil der freien Helmholtz-Energiedichte.

$$\varrho_0\, \psi_\theta \;=\; -c_{\theta t0} \left\{ \theta \ln \frac{\theta}{\theta_0} - (\theta - \theta_0) \right\} \tag{82a}$$

$$\varrho_0\, \psi_\theta \;=\; -\frac{\kappa_{c_{\theta t}}\, c_{\theta t0}}{2}\, (\theta - \theta_0)^2 \tag{82b}$$

$$\varrho_0\, \psi_\theta \;=\; c_{\theta t0} \left\{ [1 - \kappa_{c_{\theta t}}\, \theta_0] \left[(\theta - \theta_0) - \theta \ln \frac{\theta}{\theta_0} \right] - \frac{1}{2}\, \kappa_{c_{\theta t}}\, (\theta - \theta_0)^2 \right\} \tag{82c}$$

Neben der Erfüllung einer Reihe anderer, physikalisch sinnvoller Bedingungen müssen Materialmodelle für finite Verzerrungen auch den Fall kleiner Verzerrungen korrekt erfassen. Bezüglich thermoelastischer Ansätze ist beispielsweise die freie Helmholtz-Energiedichte so zu formulieren, dass das verallgemeinerte Hookesche Gesetz

$$\boldsymbol{\sigma} \;=\; 2\mu\, \boldsymbol{\varepsilon}^e \,+\, \lambda\, \mathrm{sp}\, \boldsymbol{\varepsilon}^e\, \boldsymbol{I} \;-\; 3\, \kappa\, \alpha (\theta - \theta_0)\, \boldsymbol{I} \tag{83}$$

mit dem Cauchyschen Spannungstensor $\boldsymbol{\sigma}$, dem linearisierten elastischen Verzerrungstensor $\boldsymbol{\varepsilon}^e$, den Lamé-Parametern $\lambda\,, \mu$ sowie dem Materialparameter $\kappa = \lambda + (2/3)\mu$ erfüllt wird.

Das Neo-Hooke-Modell als einfachster Ansatz für kompressibles Materialverhalten bei großen Verzerrungen (vgl. [3]) kann im thermoelastischen Fall durch die Funktion der freien Helmholtz-Energiedichte

$$\psi_e(\boldsymbol{C}^e) \;=\; c_{10}\; (I_1(\boldsymbol{C}^e) - \ln I_3(\boldsymbol{C}^e) - 3) \,+\, D_2\; (\ln I_3(\boldsymbol{C}^e))^2 \tag{84}$$

mit den Materialaparametern $c_{10}\,, D_2$ gekennzeichnet werden[6]. Da hier $\boldsymbol{C}^p = \boldsymbol{I}$ gilt, kann mit (33) unter Berücksichtigung von (28) nach einigen Umformungen das hyperelastische Materialmodell für (84) abgeleitet werden.

$$\boldsymbol{T} \;=\; c_{10}\,\frac{2}{\varphi^2}\,\boldsymbol{I} \;+\; 2\,\left(2\,D_2\,(\ln I_3(\boldsymbol{C}) - 6\ln\varphi) - c_{10}\right)\,\boldsymbol{C}^{-1} \tag{85}$$

Basierend auf allgemeinen Überlegungen zur Kinematik und Kinetik deformierbarer Körper, dem Ansatz (72) bezüglich der Funktion φ sowie den Beziehungen zwischen dem Strecktensor $\boldsymbol{C}$ und dem Verzerrungstensor $\boldsymbol{E}$ bzw. deren Invarianten lassen sich einige Abschätzungen im Fall kleiner Verzerrungen vornehmen.

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{T} &\approx \boldsymbol{\sigma} \\
\boldsymbol{C}^{-1} &\approx \boldsymbol{I} - 2\,\boldsymbol{\varepsilon}^e \\
\ln I_3(\boldsymbol{C}) &\approx I_3(\boldsymbol{C}) - 1 \approx 2\,\mathrm{sp}\,\boldsymbol{\varepsilon}^e \\
\varphi^{-2} &\approx 1 - 2\,\alpha\,(\theta-\theta_0) \;=\; 1 - 2\,\alpha\,\Delta\,\theta \\
\ln\varphi &\approx \varphi - 1 \;=\; \alpha\,(\theta-\theta_0) \;=\; \alpha\,\Delta\,\theta
\end{aligned}$$

Damit folgt aus (85):

$$\boldsymbol{\sigma} \;=\; 2\,c_{10}\,(1 - 2\,\alpha\,\Delta\,\theta)\boldsymbol{I} \;+\; 2\,\left(2\,D_2\,(2\,\mathrm{sp}\,\boldsymbol{\varepsilon}^e - 6\,\alpha\,\Delta\,\theta) - c_{10}\right)\,(\boldsymbol{I} - 2\,\boldsymbol{\varepsilon}^e) \tag{86}$$

und bei Vernachlässigung von nichtlinearen Termen bezüglich des elastischen Verzerrungstensors, der Temperaturdifferenz bzw. deren Produkte eine zum verallgemeinerten Hookeschen Gesetz äquivalente Formulierung.

$$\boldsymbol{\sigma} \;=\; 4\,c_{10}\,\boldsymbol{\varepsilon}^e \;+\; 8\,D_2\,\mathrm{sp}\,\boldsymbol{\varepsilon}^e\,\boldsymbol{I} \;-\; (4c_{10} + 24D_2)\,\alpha(\theta-\theta_0)\,\boldsymbol{I} \tag{87}$$

Ein Vergleich mit (83) ergibt

$$c_{10} \;=\; \frac{\mu}{2}\,, \qquad D_2 \;=\; \frac{\lambda}{8} \qquad \Rightarrow \qquad 4c_{10} + 24D_2 \;=\; 3\kappa\,. \tag{88}$$

Damit ist die Korrektheit des Ansatzes (84) im Sinne der Modellierung kleiner thermoelastischer Verzerrungen gewährleistet.

[6]Mit $I_1(\boldsymbol{C}^e) = \mathrm{sp}\,\boldsymbol{C}^e$ und $I_3(\boldsymbol{C}^e) = \det\boldsymbol{C}^e$ werden die erste und dritte Hauptinvariante des elastischen Verzerrungsmaßes $\boldsymbol{C}^e$ bezeichnet. Sie können aus den Grundinvarianten $J_1(\boldsymbol{C}^e) = \mathrm{sp}\,\boldsymbol{C}^e$, $J_2(\boldsymbol{C}^e) = \frac{1}{2}\mathrm{sp}\,(\boldsymbol{C}^e)^2$ und $J_3(\boldsymbol{C}^e) = \frac{1}{3}\mathrm{sp}\,(\boldsymbol{C}^e)^3$ berechnet werden. Die Zusammenhänge zwischen den Haupt- und Grundinvarianten eines zweistufigen Tensors sind beispielsweise in [3] im Detail dargestellt.

- Wärmestrahlung

$$\bar{R}_\theta \;=\; h_r\,\left(\theta^4 - \theta_r^4\right) \tag{122}$$

  mit dem Materialparameter h_r und der Temperatur der Strahlungsquelle θ_r sowie

- Wärmeübertragung durch Kontakt zweier Körper

$$\bar{R}_\theta \;=\; h_b\,(\theta - \theta_b) \tag{123}$$

  mit dem Materialparameter h_b und der Temperatur des Kontaktkörpers θ_b.

Schlussendlich kann Gleichung (118) unter Beachtung des Fourierschen Wärmeleitgesetzes (44) sowie der verkürzten Schreibweise $w_m = w_e - w_p - w_v$ und der Wärmeleitmatrix $\boldsymbol{K}_\theta$

$$\boldsymbol{K}_\theta \;=\; \lambda_H\,\sqrt{\det\boldsymbol{C}}\,\boldsymbol{C}^{-1}\,. \tag{124}$$

wie nachstehend dargestellt werden:

$$\int_{\Omega_0} c_\theta\,\dot{\theta}\,\vartheta\,d\Omega_0 \;+\; \int_{\Omega_0} (\mathrm{Grad}\,\vartheta)\,\boldsymbol{K}_\theta\,(\mathrm{Grad}\,\theta)\,d\Omega_0 \;-\; \int_{\Omega_0} w_m\,\vartheta\,d\Omega_0 \;=\; -\int_{\Gamma_{0N\theta}} \bar{R}_\theta\,\vartheta\,d\Gamma_0\,. \tag{125}$$

Mit den Beziehungen (117) und (125) besteht somit die gemischte Anfangs-Randwert-Aufgabe der Thermoelastoplastizität bei großen Verzerrungen in der Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems

$$a_0(\boldsymbol{U}\,,\theta\,;\boldsymbol{V}) \;=\; f(\boldsymbol{V}) \qquad \forall\boldsymbol{V}\in(H_0^1(\Omega_0))^3 \tag{126a}$$

$$d_0(\boldsymbol{U}\,,\theta\,;\dot{\theta},\vartheta) \;+\; c_0(\theta\,;\dot{\theta},\vartheta) \;=\; g(\vartheta) \qquad \forall\vartheta\in L_2(\Omega_0) \tag{126b}$$

bezüglich der Feldgrößen Verschiebungen $\boldsymbol{U}$ und Temperatur θ. Dabei gilt für die einzelnen Teile des Systems:

dass vollständige Feldproblem zu lösen. Aus diesem Grunde wird im Weiteren zusätzlich die Wärmeleitungsgleichung (100) herangezogen. Diese stellt ebenfalls eine Verknüpfung der betrachteten numerischen Prozessvariablen dar, was durch die in Abschnitt 1 beschriebenen Kopplungseffekte zwischen mechanischem und thermischem Teilproblem deutlich wird. Wird die lokale Wärmeleitungsgleichung in der verallgemeinerten materiellen Darstellung (100) mit einer beliebigen Testfunktion $\vartheta \in L_2(\Omega_0)$ ($\vartheta = \vartheta(\boldsymbol{X})$, $\vartheta = 0$ auf $\Gamma_{0D\vartheta}$) multipliziert und anschließend eine Integration über das Volumen des undeformierten Gebietes Ω_0 ausgeführt, folgt:

$$\int_{\Omega_0} c_\theta \, \dot{\theta} \, \vartheta \, d\Omega_0 + \int_{\Omega_0} (\operatorname{Div} \boldsymbol{Q}) \, \vartheta \, d\Omega_0 - \int_{\Omega_0} (w_e - w_p - w_v) \, \vartheta \, d\Omega_0 = 0 \,. \tag{118}$$

Mit einer zu (108) analogen Regel für die Berechnung der Divergenz des Produktes eines Vektors mit einem Skalar kann das zweite Integral der schwachen Formulierung der Wärmeleitungsgleichung (118) auch geschrieben werden als

$$\begin{aligned} &\int_{\Omega_0} (\operatorname{Div} \boldsymbol{Q}) \, \vartheta \, d\Omega_0 \\ &\quad = \int_{\Omega_0} \operatorname{Div} (\vartheta \, \boldsymbol{Q}) \, d\Omega_0 - \int_{\Omega_0} (\operatorname{Grad} \vartheta) \, \boldsymbol{Q} \, d\Omega_0 \,. \end{aligned} \tag{119}$$

Nach dem Integralsatz von Gauß-Ostrogradski gilt:

$$\int_{\Omega_0} \operatorname{Div} (\vartheta \, \boldsymbol{Q}) \, d\Omega_0 = \int_{\Gamma_{0N\theta}} \vartheta \, \mathfrak{N} \boldsymbol{Q} \, d\Gamma_0 = \int_{\Gamma_{0N\theta}} \bar{R}_\theta \, \vartheta \, d\Gamma_0 \tag{120}$$

mit der gegebenen, von äußeren Einwirkungen induzierten, relativen Wärmestromdichte $\bar{R}_\theta$ am Neumann-Rand für das Temperaturteilproblem[7]. Neben der unmittelbaren Angabe einer von außen eingeprägten Wärmestromdichte $\bar{R}_\theta$[8] normal zum betrachteten Randabschnitt können für die Wärmeleitaufgabe folgende weitere Neumann-Randbedingungen definiert werden:

- Wärmekonvektion durch Teile der Oberfläche des Körpers

$$\bar{R}_\theta = h_c \, (\theta - \theta_c) \tag{121}$$

  mit dem Materialparameter h_c und der Umgebungstemperatur θ_c,

[7] Wie bereits erwähnt, wird der komplette Rand des betrachteten Gebietes jeweils in einen Bereich mit Dirichlet-Randbedingungen und einen Bereich mit Neumann-Randbedingungen bezüglich jeder der numerischen Feldgrößen Verschiebungen sowie Temperatur unterteilt. Es gilt somit $\Gamma_0 = \Gamma_{0DU} \cup \Gamma_{0NU}$, $\Gamma_0 = \Gamma_{0D\theta} \cup \Gamma_{0N\theta}$ und $\Gamma_{0DU} \cap \Gamma_{0NU} = \emptyset$ sowie $\Gamma_{0D\theta} \cap \Gamma_{0N\theta} = \emptyset$.

[8] An einem adiabatischen (ideal wärmeisolierenden) Randabschnitt gilt $\bar{R}_\theta = 0$.

4 Wärmeleitungsgleichung unter Berücksichtigung des thermoelastischen Effekts und dissipativer Terme

Die Wärmeleitungsgleichung stellt die Evolutionsgleichung für die zeitliche und örtliche Entwicklung des Temperaturfeldes dar. Ihre Herleitung basiert auf der materiellen Zeitableitung der nach der spezifischen inneren Energie umgestellten Beziehung (22) unter Berücksichtigung der materiellen Zeitableitung der freien Helmholtz-Energiedichte (30) sowie der Beziehung für die Entropie (37).

$$\begin{aligned} \dot{\epsilon} &= \dot{\psi} + \dot{\theta} \, \eta + \theta \, \dot{\eta} \\ &= \frac{\partial \bar{\psi}_e}{\partial \boldsymbol{C}^e} \cdot\cdot \dot{\boldsymbol{C}}^{e\mathrm{T}} + \frac{\partial \psi_p}{\partial \widehat{\boldsymbol{A}}_1} \cdot\cdot \dot{\widehat{\boldsymbol{A}}}_1{}^{\mathrm{T}} + \frac{\partial \psi_p}{\partial \widehat{\boldsymbol{A}}_2} \cdot\cdot \dot{\widehat{\boldsymbol{A}}}_2{}^{\mathrm{T}} + \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \, \dot{\theta} \\ &\quad - \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \, \dot{\theta} + \left(\frac{1}{\varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial \theta} \frac{1}{\varrho_0} \boldsymbol{T} \cdot\cdot \boldsymbol{C} \right) \dot{\theta} + \theta \, \dot{\eta} \end{aligned} \tag{89}$$

Aus dem Vergleich dieser Beziehung mit dem 1. Hauptsatz der Thermodynamik (20) folgt eine Gleichung für die materielle Zeitableitung der Entropie.

$$\begin{aligned} \theta \, \dot{\eta} &= \frac{1}{2\varrho_0} \boldsymbol{T} \cdot\cdot \dot{\boldsymbol{C}} - \frac{1}{\varrho_0} \operatorname{Div} \boldsymbol{Q} + H - \frac{\partial \bar{\psi}_e}{\partial \boldsymbol{C}^e} \cdot\cdot \dot{\boldsymbol{C}}^{e\mathrm{T}} \\ &\quad - \frac{\partial \psi_p}{\partial \widehat{\boldsymbol{A}}_1} \cdot\cdot \dot{\widehat{\boldsymbol{A}}}_1 + \frac{\partial \psi_p}{\partial \widehat{\boldsymbol{A}}_2} \cdot\cdot \dot{\widehat{\boldsymbol{A}}}_2 - \left(\frac{1}{\varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial \theta} \frac{1}{\varrho_0} \boldsymbol{T} \cdot\cdot \boldsymbol{C} \right) \dot{\theta} \end{aligned} \tag{90}$$

Nach (28) lautet der Rechts-Cauchy Green-Tensor

$$\boldsymbol{C} = \varphi^2(\theta) \, \boldsymbol{C}^e \boldsymbol{C}^p \tag{91}$$

mit der materiellen Zeitableitung

$$\begin{aligned} \dot{\boldsymbol{C}} &= 2 \varphi \frac{\partial \varphi}{\partial \theta} \boldsymbol{C}^e \boldsymbol{C}^p \, \dot{\theta} + \varphi^2 \dot{\boldsymbol{C}}^e \boldsymbol{C}^p + \varphi^2 \boldsymbol{C}^e \dot{\boldsymbol{C}}^p \\ &= \frac{2}{\varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial \theta} \boldsymbol{C} \, \dot{\theta} + \dot{\boldsymbol{C}}^e \boldsymbol{C}^{p\theta} + \boldsymbol{C} \boldsymbol{C}^{p-1} \dot{\boldsymbol{C}}^p \\ &= \frac{2}{\varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial \theta} \boldsymbol{C} \, \dot{\theta} + \dot{\boldsymbol{C}}^e \boldsymbol{C}^{p\theta} - \boldsymbol{C} \dot{\boldsymbol{C}}^{p-1} \boldsymbol{C}^p \,. \end{aligned} \tag{92}$$

Es folgt unter Beachtung der Symmetrie von $\boldsymbol{T}$ und $\boldsymbol{C}^{p\theta}$, des elastischen Modells (33) sowie des Ansatzes für den thermischen Teildeformationsgradienten (19):

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{2\varrho_0}\boldsymbol{T}\cdot\cdot\dot{\boldsymbol{C}} &= \left(\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\frac{1}{\varrho_0}\boldsymbol{T}\cdot\cdot\boldsymbol{C}\right)\dot{\theta}+\frac{1}{2\varrho_0}\boldsymbol{C}^{p\theta}\boldsymbol{T}\cdot\cdot\dot{\boldsymbol{C}}^{e}-\frac{1}{2\varrho_0}\boldsymbol{C}^{p}\boldsymbol{T}\boldsymbol{C}\cdot\cdot\dot{\boldsymbol{C}}^{p-1}\\
&= \left(\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\frac{1}{\varrho_0}\boldsymbol{T}\cdot\cdot\boldsymbol{C}\right)\dot{\theta}+\frac{1}{2\varrho_0}\boldsymbol{T}\boldsymbol{C}^{p\theta}\cdot\cdot\dot{\boldsymbol{C}}^{e\mathrm{T}}-\frac{1}{2\varrho_0}\boldsymbol{C}^{p}\boldsymbol{T}\boldsymbol{C}\cdot\cdot\dot{\boldsymbol{C}}^{p-1}\\
&= \left(\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\frac{1}{\varrho_0}\boldsymbol{T}\cdot\cdot\boldsymbol{C}\right)\dot{\theta}+\frac{1}{2\varrho_0}\frac{2\varrho_0}{\varphi^2}\frac{\partial\bar{\psi}_e}{\partial\boldsymbol{C}^e}\boldsymbol{C}^{p-1}\boldsymbol{C}^{p\theta}\cdot\cdot\dot{\boldsymbol{C}}^{e\mathrm{T}}\\
&\quad-\frac{1}{2\varrho_0}\boldsymbol{C}^{p}\boldsymbol{T}\boldsymbol{C}\cdot\cdot\dot{\boldsymbol{C}}^{p-1}\\
&= \left(\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\frac{1}{\varrho_0}\boldsymbol{T}\cdot\cdot\boldsymbol{C}\right)\dot{\theta}+\frac{\partial\bar{\psi}_e}{\partial\boldsymbol{C}^e}\cdot\cdot\dot{\boldsymbol{C}}^{e\mathrm{T}}-\frac{1}{2\varrho_0}\boldsymbol{C}^{p}\boldsymbol{T}\boldsymbol{C}\cdot\cdot\dot{\boldsymbol{C}}^{p-1}. \qquad (93)
\end{aligned}
$$

Damit kann die Beziehung (90) vereinfacht werden. Nach den erforderlichen pull-back-Operationen auf die Ausgangskonfiguration folgt mit den Definitionen (46):

$$
\begin{aligned}
\theta\,\dot{\eta} &= -\frac{1}{\varrho_0}\,\mathrm{Div}\,\boldsymbol{Q}+H\\
&\quad-\frac{1}{2\varrho_0}\boldsymbol{C}^{p}\boldsymbol{T}\boldsymbol{C}\cdot\cdot\dot{\boldsymbol{C}}^{p-1}-\frac{1}{\varrho_0}\boldsymbol{\alpha}\cdot\cdot\overset{\triangle}{\boldsymbol{A}}_1-\frac{1}{\varrho_0}\boldsymbol{T}^{p}\cdot\cdot\overset{\triangle}{\boldsymbol{A}}_2. \qquad (94)
\end{aligned}
$$

Um die Entropie aus diesem Ansatz eliminieren zu können, soll im Weiteren die materielle Zeitableitung der Gleichung (37) im Detail diskutiert werden. Unter Berücksichtigung der Definitionen (46) gilt für den ersten Summanden:

$$
\begin{aligned}
\theta\left(\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)^{\cdot} &= \theta\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2}\dot{\theta}+\theta\frac{\partial^2\bar{\psi}_e}{\partial\boldsymbol{C}^e\partial\theta}\cdot\cdot\dot{\boldsymbol{C}}^{e\mathrm{T}}\\
&\quad+\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\frac{\partial\psi_p}{\partial\widehat{\boldsymbol{A}}_1}\right)\cdot\cdot\dot{\widehat{\boldsymbol{A}}}_1{}^{\mathrm{T}}+\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\frac{\partial\psi_p}{\partial\widehat{\boldsymbol{A}}_2}\right)\cdot\cdot\dot{\widehat{\boldsymbol{A}}}_2{}^{\mathrm{T}}\\
&= \theta\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2}\dot{\theta}+\theta\frac{\partial^2\bar{\psi}_e}{\partial\boldsymbol{C}^e\partial\theta}\cdot\cdot\dot{\boldsymbol{C}}^{e\mathrm{T}}+\frac{\theta}{\varrho_0}\frac{\partial\widehat{\boldsymbol{\alpha}}}{\partial\theta}\cdot\cdot\dot{\widehat{\boldsymbol{A}}}_1+\frac{\theta}{\varrho_0}\frac{\partial\widehat{\boldsymbol{T}}^{p}}{\partial\theta}\cdot\cdot\dot{\widehat{\boldsymbol{A}}}_2\\
&= \theta\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2}\dot{\theta}+\theta\frac{\partial^2\bar{\psi}_e}{\partial\boldsymbol{C}^e\partial\theta}\cdot\cdot\dot{\boldsymbol{C}}^{e\mathrm{T}}+\frac{\theta}{\varrho_0}\frac{\partial\boldsymbol{\alpha}}{\partial\theta}\cdot\cdot\overset{\triangle}{\boldsymbol{A}}_1+\frac{\theta}{\varrho_0}\frac{\partial\boldsymbol{T}^{p}}{\partial\theta}\cdot\cdot\overset{\triangle}{\boldsymbol{A}}_2. \qquad (95)
\end{aligned}
$$

Die materielle Zeitableitung des zweiten Summanden der Bestimmungsgleichung für die Entropie (37) erfordert eine sorgfältige Analyse.

$$
\begin{aligned}
\theta\left(\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\frac{1}{\varrho_0}\boldsymbol{T}\cdot\cdot\boldsymbol{C}\right)^{\cdot} &= \theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\frac{1}{\varrho_0}\boldsymbol{T}\cdot\cdot\boldsymbol{C}\right)\dot{\theta}\\
&\quad+\theta\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\frac{1}{\varrho_0}\dot{\boldsymbol{T}}\cdot\cdot\boldsymbol{C}+\theta\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\frac{1}{\varrho_0}\boldsymbol{T}\cdot\cdot\dot{\boldsymbol{C}} \qquad (96)
\end{aligned}
$$

mit dem nach außen gerichteten Normalenvektor $\mathfrak{N}$ auf dem Rand des Gebietes Ω_0. Damit lautet die schwache Formulierung des Gleichgewichts:

$$
\int_{\Gamma_{0NU}}\mathfrak{N}\,\boldsymbol{T}\boldsymbol{F}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}\,d\Gamma_0-\int_{\Omega_0}\boldsymbol{T}\boldsymbol{F}^{\mathrm{T}}\cdot\cdot\,(\mathrm{Grad}\boldsymbol{V})^{T}\,d\Omega_0+\int_{\Omega_0}\varrho_0\boldsymbol{B}\boldsymbol{V}\,d\Omega_0=\boldsymbol{0}. \qquad (112)
$$

Bei Vernachlässigung volumenförmiger Kräfte sowie Beachtung von Rechenregeln für einfache und doppelte Überschiebungen von Tensoren zweiter Stufe vereinfacht sich (112) zu

$$
\int_{\Omega_0}\boldsymbol{T}\cdot\cdot\boldsymbol{F}^{\mathrm{T}}\,(\mathrm{Grad}\boldsymbol{V})^{T}\,d\Omega_0=\int_{\Gamma_{0NU}}\mathfrak{N}\,\boldsymbol{T}\boldsymbol{F}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}\,d\Gamma_0=\int_{\Gamma_{0NU}}\bar{\boldsymbol{R}}_U\boldsymbol{V}\,d\Gamma_0 \qquad (113)
$$

mit der gegebenen äußeren Belastung $\bar{\boldsymbol{R}}_U$ (Spannungsvektor) am Neumann-Rand für das mechanische Problem. Unter Berücksichtigung der Beziehung (12) folgt daraus:

$$
\int_{\Omega_0}\boldsymbol{T}\cdot\cdot\left[(\mathrm{Grad}\boldsymbol{V})^{T}+\mathrm{Grad}\boldsymbol{U}\,(\mathrm{Grad}\boldsymbol{V})^{T}\right]d\Omega_0=\int_{\Gamma_{0NU}}\bar{\boldsymbol{R}}_U\boldsymbol{V}\,d\Gamma_0\,. \qquad (114)
$$

Wegen $\boldsymbol{A}\cdot\cdot\boldsymbol{B}=\boldsymbol{A}^{T}\cdot\cdot\boldsymbol{B}^{T}$ ($\boldsymbol{A}$, $\boldsymbol{B}$ beliebige zweistufige Tensoren) und der Symmetrie des 2. Piola-Kirchhoffschen Spannungstensors gilt:

$$
\boldsymbol{T}\cdot\cdot\boldsymbol{Y}=\boldsymbol{T}\cdot\cdot\boldsymbol{Y}^{T}=\frac{1}{2}\boldsymbol{T}\cdot\cdot\left(\boldsymbol{Y}+\boldsymbol{Y}^{T}\right) \qquad (115)
$$

$$
\text{mit}\qquad \boldsymbol{Y}=(\mathrm{Grad}\boldsymbol{V})^{T}+\mathrm{Grad}\boldsymbol{U}\,(\mathrm{Grad}\boldsymbol{V})^{T}\,.
$$

Folglich lässt sich die Gleichung (114) mit der zusätzlichen Definition

$$
\begin{aligned}
&2\,\boldsymbol{E}\,(\boldsymbol{U};\boldsymbol{V})\overset{\mathrm{def}}{=}\\
&\quad(\mathrm{Grad}\boldsymbol{V})^{T}+\mathrm{Grad}\boldsymbol{V}+\mathrm{Grad}\boldsymbol{U}(\mathrm{Grad}\boldsymbol{V})^{T}+\mathrm{Grad}\boldsymbol{V}(\mathrm{Grad}\boldsymbol{U})^{T} \qquad (116)
\end{aligned}
$$

wie nachstehend darstellen:

$$
\int_{\Omega_0}\boldsymbol{T}\cdot\cdot\boldsymbol{E}\,(\boldsymbol{U};\boldsymbol{V})\,d\Omega_0=\int_{\Gamma_{0NU}}\bar{\boldsymbol{R}}_U\boldsymbol{V}\,d\Gamma_0\,. \qquad (117)
$$

Wegen der Einwirkung der Temperaturgeschichte auf das mechanische Problem und der Rückkopplung (vorrangig dissipativer) mechanischer Prozesse auf die Entwicklung des Temperaturfeldes liegen mit den Verschiebungen und der Temperatur unterschiedliche Feldvariablen als numerische Prozessgrößen vor, die sich gegenseitig beeinflussen. Demzufolge reicht die Beziehung (117) allein nicht aus,

Gravitation) aus. Mit Hilfe tensoralgebraischer und tensoranalytischer Betrachtungen (vgl. [16]) kann daraus die folgende verallgemeinerte materielle Darstellung abgeleitet werden:

$$\mathrm{Div}\left(\boldsymbol{T}\boldsymbol{F}^{\mathrm{T}}\right) + \varrho_0\boldsymbol{B} = \boldsymbol{0}\,. \tag{106}$$

Dabei ist diese Beziehung so zu interpretieren, dass die beiden Terme $\mathrm{Div}\left(\boldsymbol{T}\boldsymbol{F}^{\mathrm{T}}\right)$ und $\varrho_0\boldsymbol{B}$ volumenbezogene Kraftvektoren darstellen, die unter Verwendung des so genannten Shifters auf die Basis der Ausgangskonfiguration bezogen sind und mit Hilfe des Bewegungsgesetzes (8) als Funktionen der Koordinaten dieser Konfiguration definiert werden können.

Nach Multiplikation von (106) mit einer beliebigen Testfunktion $\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}(\boldsymbol{X})$ (wobei gilt: $\boldsymbol{V} \in (H_0^1(\Omega_0))^3$, $\boldsymbol{V} = \boldsymbol{0}$ auf Γ_{0DU}) und Integration über das Volumen des undeformierten Gebietes Ω_0 folgt aus (106) die schwache Formulierung des Gleichgewichts:

$$\int_{\Omega_0} \mathrm{Div}\left(\boldsymbol{T}\boldsymbol{F}^{\mathrm{T}}\right)\boldsymbol{V}\,d\Omega_0 + \int_{\Omega_0}\varrho_0\boldsymbol{B}\boldsymbol{V}\,d\Omega_0 = \boldsymbol{0}\,. \tag{107}$$

Wird die Testfunktion als virtuelle Verschiebung interpretiert, stellt (107) das Prinzip der virtuellen Arbeit dar.

Mit der Regel zur Berechnung der Divergenz eines einfachen Skalarproduktes aus einem beliebigen zweistufigen symmetrischen Tensor $\boldsymbol{Z}$ und einem beliebigen Vektor $\boldsymbol{W}$ als Funktionen der Koordinaten der Ausgangskonfiguration

$$\mathrm{Div}\left(\boldsymbol{Z}\boldsymbol{W}\right) = \left(\mathrm{Div}\,\boldsymbol{Z}\right)\boldsymbol{W} + \boldsymbol{Z} \cdot\cdot \left(\mathrm{Grad}\,\boldsymbol{W}\right)^T \tag{108}$$

$$\text{mit}\quad \mathrm{Grad}\,\boldsymbol{W} = \boldsymbol{G}^K\frac{\partial\left(W^I(\boldsymbol{G})_I\right)}{\partial X^K} \tag{109}$$

kann das erste Integral in Gleichung (107) auch geschrieben werden als

$$\begin{aligned}&\int_{\Omega_0}\mathrm{Div}\left(\boldsymbol{T}\boldsymbol{F}^{\mathrm{T}}\right)\boldsymbol{V}\,d\Omega_0\\ &\quad= \int_{\Omega_0}\mathrm{Div}\left(\boldsymbol{T}\boldsymbol{F}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}\right)d\Omega_0 - \int_{\Omega_0}\boldsymbol{T}\boldsymbol{F}^{\mathrm{T}} \cdot\cdot \left(\mathrm{Grad}\boldsymbol{V}\right)^T d\Omega_0\,.\end{aligned} \tag{110}$$

Nach dem Integralsatz von Gauß-Ostrogradski gilt:

$$\int_{\Omega_0}\mathrm{Div}\left(\boldsymbol{T}\boldsymbol{F}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}\right)d\Omega_0 = \int_{\Gamma_{0NU}}\mathfrak{N}\left(\boldsymbol{T}\boldsymbol{F}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}\right)d\Gamma_0 \tag{111}$$

Dabei ist in den materiellen Zeitableitungen des Terms

$$\theta\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\frac{1}{\varrho_0}\dot{\boldsymbol{T}} \cdot\cdot \boldsymbol{C} + \theta\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\frac{1}{\varrho_0}\boldsymbol{T} \cdot\cdot \dot{\boldsymbol{C}} \tag{97}$$

die Abhängigkeit von der Temperatur nicht mehr zu erfassen, da sie vollständig im ersten Term der rechten Seite von (96) enthalten ist. In diesem Zusammenhang kann (96) unter Beachtung von (33) und (92) sowie der Symmetrie wesentlicher Tensoren ausführlich dargestellt werden.

$$\begin{aligned}\theta\left(\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\frac{1}{\varrho_0}\boldsymbol{T} \cdot\cdot \boldsymbol{C}\right)^{\cdot} &= \theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\frac{1}{\varrho_0}\boldsymbol{T} \cdot\cdot \boldsymbol{C}\right)\dot{\theta}\\ &\quad+\theta\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\frac{1}{\varrho_0}\frac{2\varrho_0}{\varphi^2}\boldsymbol{C} \cdot\cdot \frac{\partial^2\bar{\psi}_e}{\partial\boldsymbol{C}^e\partial\boldsymbol{C}^e}\boldsymbol{C}^{p-1} \cdot\cdot \dot{\boldsymbol{C}}^{e\mathrm{T}}\\ &\quad+\theta\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\frac{1}{\varrho_0}\frac{2\varrho_0}{\varphi^2}\frac{\partial\bar{\psi}_e}{\partial\boldsymbol{C}^e}\dot{\boldsymbol{C}}^{p-1} \cdot\cdot \boldsymbol{C}\\ &\quad+\theta\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\frac{1}{\varrho_0}\boldsymbol{T} \cdot\cdot \varphi^2\,\dot{\boldsymbol{C}}^e\boldsymbol{C}^p + \theta\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\frac{1}{\varrho_0}\boldsymbol{T} \cdot\cdot \varphi^2\,\boldsymbol{C}^e\dot{\boldsymbol{C}}^p\\ &= \theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\frac{1}{\varrho_0}\boldsymbol{T} \cdot\cdot \boldsymbol{C}\right)\dot{\theta}\\ &\quad+\theta\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\frac{1}{\varrho_0}\boldsymbol{C} \cdot\cdot \frac{\partial}{\partial\boldsymbol{C}^e}\left(\frac{2\varrho_0}{\varphi^2}\frac{\partial\bar{\psi}_e}{\partial\boldsymbol{C}^e}\boldsymbol{C}^{p-1}\right) \cdot\cdot \dot{\boldsymbol{C}}^{e\mathrm{T}}\\ &\quad+\theta\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\frac{1}{\varrho_0}\left(\frac{2\varrho_0}{\varphi^2}\frac{\partial\bar{\psi}_e}{\partial\boldsymbol{C}^e}\boldsymbol{C}^{p-1}\right) \cdot\cdot \boldsymbol{C}^p\dot{\boldsymbol{C}}^{p-1}\boldsymbol{C}\\ &\quad+\theta\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\frac{1}{\varrho_0}\boldsymbol{T} \cdot\cdot \dot{\boldsymbol{C}}^e\boldsymbol{C}^{p\theta} - \theta\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\frac{1}{\varrho_0}\boldsymbol{T} \cdot\cdot \boldsymbol{C}\dot{\boldsymbol{C}}^{p-1}\boldsymbol{C}^p\\ &= \theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\frac{1}{\varrho_0}\boldsymbol{T} \cdot\cdot \boldsymbol{C}\right)\dot{\theta}\\ &\quad+\theta\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\frac{1}{\varrho_0}\boldsymbol{C} \cdot\cdot \frac{\partial\boldsymbol{T}}{\partial\boldsymbol{C}^e} \cdot\cdot \dot{\boldsymbol{C}}^{e\mathrm{T}}\\ &\quad+\theta\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\frac{1}{\varrho_0}\boldsymbol{T} \cdot\cdot \boldsymbol{C}^p\dot{\boldsymbol{C}}^{p-1}\boldsymbol{C}\\ &\quad+\theta\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\frac{1}{\varrho_0}\boldsymbol{T}^{\mathrm{T}} \cdot\cdot \boldsymbol{C}^{p\theta\mathrm{T}}\dot{\boldsymbol{C}}^{e\mathrm{T}}\\ &\quad-\theta\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\frac{1}{\varrho_0}\boldsymbol{T}^{\mathrm{T}} \cdot\cdot \boldsymbol{C}^{p\mathrm{T}}\dot{\boldsymbol{C}}^{p-\mathrm{T}}\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}\end{aligned}$$

Weitere Umformungen ergeben

$$\begin{aligned}
&\theta\left(\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\frac{1}{\varrho_0}\boldsymbol{T}\cdot\cdot\boldsymbol{C}\right)^{\cdot}\\
&\quad=\ \theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\frac{1}{\varrho_0}\boldsymbol{T}\cdot\cdot\boldsymbol{C}\right)\dot{\theta}\\
&\qquad+\theta\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\frac{1}{\varrho_0}\boldsymbol{C}\cdot\cdot\frac{\partial\boldsymbol{T}}{\partial\boldsymbol{C}^e}\cdot\cdot\dot{\boldsymbol{C}}^{e\mathrm{T}}+\theta\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\frac{1}{\varrho_0}\boldsymbol{C}\boldsymbol{T}\boldsymbol{C}^p\cdot\cdot\dot{\boldsymbol{C}}^{p-1}\\
&\qquad+\theta\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\frac{1}{\varrho_0}\boldsymbol{T}\boldsymbol{C}^{p\theta}\cdot\cdot\dot{\boldsymbol{C}}^{e\mathrm{T}}-\theta\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\frac{1}{\varrho_0}\boldsymbol{C}\boldsymbol{T}\boldsymbol{C}^p\cdot\cdot\dot{\boldsymbol{C}}^{p-1}\\
&\quad=\ \theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\frac{1}{\varrho_0}\boldsymbol{T}\cdot\cdot\boldsymbol{C}\right)\dot{\theta}\\
&\qquad+\theta\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\frac{1}{\varrho_0}\boldsymbol{C}\cdot\cdot\frac{\partial\boldsymbol{T}}{\partial\boldsymbol{C}^e}\cdot\cdot\dot{\boldsymbol{C}}^{e\mathrm{T}}+\theta\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\frac{1}{\varrho_0}\boldsymbol{T}\boldsymbol{C}^{p\theta}\cdot\cdot\dot{\boldsymbol{C}}^{e\mathrm{T}}\,.
\end{aligned}\tag{98}$$

Durch den Vergleich von

$$\theta\,\dot{\eta}=-\theta\left(\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)^{\cdot}+\theta\left(\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\frac{1}{\varrho_0}\boldsymbol{T}\cdot\cdot\boldsymbol{C}\right)^{\cdot}\tag{99}$$

mit (94) folgt bei Einbeziehung der materiellen Zeitableitungen (95) sowie (98) nach Multiplikation mit der Massedichte des Ausgangszustandes ϱ_0 und Vernachlässigung von Wärmequellen die Wärmeleitungsgleichung für das betrachtete Materialmodell der finiten Elastoplastizität.

$$c_\theta\,\dot{\theta}+\mathrm{Div}\,\boldsymbol{Q}\ -\ w_e\ +\ w_p\ +\ w_v\ =\ 0\tag{100}$$

Dabei repräsentieren in einer konsequenten Formulierung bezüglich der Ausgangskonfiguration

- c_θ die spezifische Wärmekapazität

$$c_\theta\ =\ \theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\boldsymbol{T}\cdot\cdot\boldsymbol{C}\right)\ -\ \theta\frac{\partial^2(\varrho_0\psi)}{\partial\theta^2}\ =\ c_{\theta m}\ +\ c_{\theta t}\,,\tag{101}$$

- w_e die so genannte thermoelastische Kopplung

$$w_e\ =\ \theta\left[\frac{\partial^2(\varrho_0\bar{\psi}_e)}{\partial\boldsymbol{C}^e\partial\theta}-\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta}\left(\boldsymbol{C}\cdot\cdot\frac{\partial\boldsymbol{T}}{\partial\boldsymbol{C}^e}+\boldsymbol{T}\boldsymbol{C}^{p\theta}\right)\right]\cdot\cdot\,\dot{\boldsymbol{C}}^{e\mathrm{T}}\,,\tag{102}$$

- w_p die gesamte plastische Spannungsleistung

$$w_p\ =\ \frac{1}{2}\boldsymbol{C}^p\boldsymbol{T}\boldsymbol{C}\cdot\cdot\dot{\boldsymbol{C}}^{p-1}\ =\ -\frac{1}{2}\boldsymbol{T}\boldsymbol{C}\boldsymbol{C}^{p-1}\cdot\cdot\dot{\boldsymbol{C}}^{p}\tag{103}$$

- und w_v den als innere Energie gespeicherten Anteil der plastischen Spannungsleistung

$$w_v\ =\ \left(\boldsymbol{\alpha}\ -\ \theta\frac{\partial\boldsymbol{\alpha}}{\partial\theta}\right)\cdot\cdot\overset{\triangle}{\boldsymbol{A}}_1\ +\ \left(\boldsymbol{T}^p\ -\ \theta\frac{\partial\boldsymbol{T}^p}{\partial\theta}\right)\cdot\cdot\overset{\triangle}{\boldsymbol{A}}_2\,.\tag{104}$$

Im Gegensatz zu anderen Autoren wird hier die thermoelastische Kopplung nicht vernachlässigt. Das Wissen um den thermoelastischen Effekt kann in praktischen Experimenten zur Charakterisierung bestimmter Materialeigenschaften genutzt werden. So wurde z. B. in Zugversuchen an Metallproben festgestellt, dass im elastischen Bereich bei Volumenvergrößerung eine messbare Abkühlung stattfindet, während unmittelbar nach der Plastizierung durch dissipative Effekte ein Temperaturanstieg zu verzeichnen ist. Somit kann der thermoelastische Effekt für eine zuverlässige Bestimmung des plastischen Fließbeginns genutzt werden.

Wie oben erwähnt, wird ein Teil der plastischen Dissipationsleistung u. a. im Ergebnis von Versetzungsinteraktionen im Kristallgitter als innere Energie gespeichert. Auch dieser Anteil wird häufig in der Literatur vernachlässigt. Alternativ wird deshalb die plastische Dissipation mit einem heuristisch ermittelten Faktor festgelegt. In dem vorgestellten Ansatz sind die entsprechenden Anteile auf der Basis konstitutiver Annahmen *per se* enthalten.

5 Randwertaufgabe der Thermoelastoplastizität bei großen Verzerrungen in Lagrangescher Formulierung

5.1 Schwache Formulierungen des Impulssatzes und der Wärmeleitungsgleichung

Die aus dem Impulssatz folgenden mechanischen Gleichgewichtsbedingungen sind originär in der Momentankonfiguration definiert. Ihre lokale, räumliche Formulierung

$$\mathrm{div}\,\boldsymbol{\sigma}\ +\ \varrho\boldsymbol{b}\ =\ \boldsymbol{0}\tag{105}$$

drückt die Bilanz zwischen der Divergenz der Cauchy-Spannung sowie massebezogenen Kräften $\boldsymbol{b}$ zur Charakterisierung von Nah- und Fernfeldwirkungen (z. B.